

**JOSÉ LAURO STRAPASSON**

**IMPLEMENTAÇÃO DE POTENCIAIS ARBITRÁRIOS NA  
SIMULAÇÃO DIRETA DE MONTE CARLO**

Tese de doutorado apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física do Setor de Ciências Exatas da Universidade Federal do Paraná como requisito parcial à obtenção do título de Doutor em Ciências.

Orientador: Prof. Dr. Felix Sharipov.

**CURITIBA  
2015**

---

S897i

Strapasson, José Lauro  
Implementação de potenciais arbitrários na simulação direta de Monte Carlo/ José Lauro Strapasson. – Curitiba, 2015.  
186 f. : il. color. ; 30 cm.

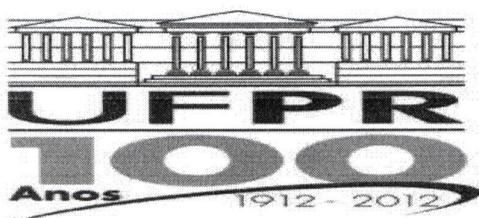
Tese - Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências Exatas,  
Programa de Pós-graduação em Física, 2015.

Orientador: Felix Sharipov .  
Bibliografia: p. 128-147.

1. Método de Monte Carlo - Processamento de dados. 2. Teoria do potencial. 3. Dinâmica dos gases rarefeitos. I. Universidade Federal do Paraná. II.Sharipov, Felix. III. Título.

CDD: 518.282

---



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ  
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS  
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA  
Fone: (41) 3361-3096 Fax: (41) 3361-3418  
E-mail: [posgrad@fisica.ufpr.br](mailto:posgrad@fisica.ufpr.br)

## PARECER

Os abaixo-assinados, membros da banca examinadora de Defesa de Tese de Doutorado do aluno **JOSÉ LAURO STRAPASSON**, consideram aprovada a redação final da tese, cujo título é: *“Implementação de Potenciais Arbitrários na Simulação Direta de Monte Carlo”*.

Curitiba, 17 de julho de 2015.

Banca Examinadora

Assinatura

Prof. Dr. Felix Sharipov (UFPR)

A

Prof. Dr. Ricardo Luiz Viana (UFPR)

A

Prof. Dr. Wilson Marques Junior (UFPR)

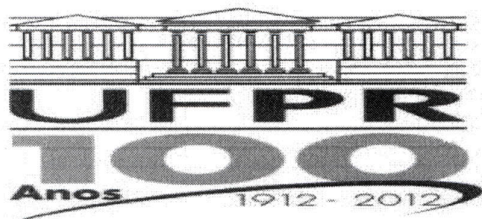
A

Prof. Dr. Wagner Figueiredo (UFSC)

A

Prof. Dr. José Danilo Szezech Junior (UEPG)

A.



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ  
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS  
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA  
Fone: (41) 3361-3096 Fax: (41) 3361-3418  
E-mail: [posgrad@fisica.ufpr.br](mailto:posgrad@fisica.ufpr.br)

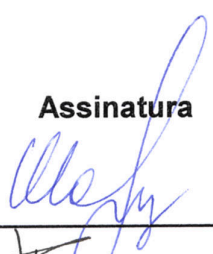
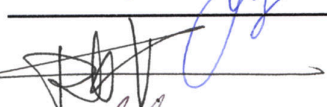
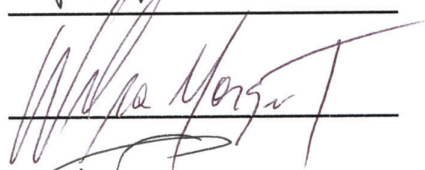
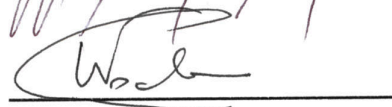
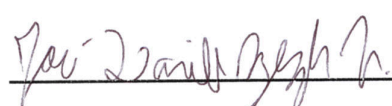
## ATA DE DEFESA DE TESE DE DOUTORADO

### Implementação de Potenciais Arbitrários na Simulação Direta de Monte Carlo.

ALUNO

JOSÉ LAURO STRAPASSON

Em sessão pública iniciada às quatorze horas do dia 17 de julho de 2015, após um seminário sob o título acima e posterior arguição, esta banca examinadora decidiu aprovar. o candidato com o conceito global A.

Banca Examinadora	Assinatura	Conceito
Prof. Dr. Felix Sharipov (UFPR)		<u>A.</u>
Prof. Dr. Ricardo Luiz Viana (UFPR)		<u>A.</u>
Prof. Dr. Wilson Marques Junior (UFPR)		<u>A</u>
Prof. Dr. Wagner Figueiredo (UFSC)		<u>A</u>
Prof. Dr. José Danilo Szezech Junior (UEPG)		<u>A</u>

# Abstract

First, a scheme to implement an arbitrary intermolecular potential into the direct simulation Monte Carlo method is proposed. To illustrate the scheme, two benchmark problems are solved employing the Lennard-Jones potential.

Then, *ab initio* potentials are implemented into the direct simulation Monte Carlo (DSMC) method. Such an implementation allows to model transport phenomena in rarefied gases without any fitting parameter of intermolecular collisions usually extracted from experimental data. Applying the method proposed by the authors in *Phys. Fluids* **24** 011703 (2012), the use of *ab initio* potentials in the DSMC requires the same computational efforts as the widely used potentials such as hard spheres, variable hard sphere, variable soft spheres *etc.* At the same time, the *ab initio* potentials provides more reliable results than any other one. As an example, two of the transport coefficients of a binary mixture He-Ar, *viz.*, viscosity and thermal conductivity, are calculated for several values of the mole fraction. Since the computational effort of the new scheme is comparable with that of the hard sphere model of molecules, this new scheme can completely substitute the widely used models such as variable hard spheres and variable soft spheres.

Then, the planar Couette flow for gaseous mixture He-Ar is calculated by the DSMC method based on *ab initio* potential over the whole range of the gas rarefaction for several values of the mole fraction and for two values of the wall speed. The smaller value of the speed corresponds to the limit when the non-linear terms are negligible, while the larger value describes a non-linear flow. The shear stress, velocity gradient, temperature and mole fraction

profiles are presented. The reported results can be used as benchmark data to test model kinetic equations for gaseous mixtures. To study the influence of the intermolecular potential, the same simulations are carried out for the hard sphere molecular model. A relative deviation of the results based on this model from those based on the *ab initio* potential is analyzed. It is pointed out that the difference between the shear stresses of the two potentials for the linearized solution is within 1%, while it reaches 6% for the non-linear cases.

Next, the heat flux problem for a binary gaseous mixture confined between two parallel plates with different temperatures is studied on the basis of the DSMC method with an implementation of *ab initio* potential. The calculations are carried for a wide range of the gas rarefaction, for several values of the mole fraction and for two values of the temperature difference. The smaller value of the difference corresponds to the limit when the nonlinear terms are negligible, while the larger value describes a nonlinear heat transfer. The heat flux, temperature, and mole fraction distributions are presented. To study the influence of the intermolecular potential, the same simulations were carried out for the hard sphere molecular model. A relative deviation of the results based on this model from those based on the *ab initio* potential is analyzed. It is pointed out that the difference between the heat flux of the two potentials is about 8% and 5% for the small and large temperature differences, respectively. The temperature distribution between plates is weakly affected by the molecular potential, while the chemical composition variation is the most sensitive quantity for the considered problem. The reported results can be used as benchmark data to test model kinetic equations for gaseous mixtures.

Finally, a rarefied gas flow through a thin orifice is calculated for three noble gases, helium, argon and krypton, applying the DSMC method based on the *ab initio* potential. The calculations are carried out over the whole range of the gas rarefaction and for several values of the pressure ratio with the numerical error less than 0.5%. A comparative analysis shows that the relative

difference of the flow rate based on the *ab initio* potential from that obtained for the hard sphere molecular model depends on many factors, namely, gas species, pressure ratio, gas rarefaction and gas temperature. Among the gases considered here, the difference for helium is the smallest and does not exceed 0.7%. The deviation for krypton is the largest and reaches 1.4%. A relative deviation of the flow rate due to the temperature variation is within 0.9%. A comparison of the flowfield shows that the Mach discs for the *ab initio* potential are stronger than those for the hard sphere model.

# Resumo

Um esquema para implementar um potencial arbitrário na Simulação Direta de Monte Carlo é proposto. Para ilustrar esse esquema, dois problemas testes foram resolvidos usando o potencial de Lennard-Jones.

Os potenciais AI também foram implementados na Simulação Direta de Monte Carlo (DSMC). Tal implementação permite modelar os fenômenos de transporte em gases rarefeitos sem nenhum parâmetro de ajuste de colisões intermoleculares que normalmente são extraídos de dados experimentais. Aplicando o método proposto em *Phys. Fluids* **24** 011703 (2012), o uso de potenciais *ab initio* em DSMC requer o mesmo esforço computacional de potenciais amplamente utilizados como o de esferas rígidas, esferas rígidas variáveis, esferas moles variáveis *etc.* Ao mesmo tempo, os potenciais *ab initio* permitem obter resultados mais confiáveis do que qualquer outro método. Como exemplo, dois dos coeficientes de transporte para a mistura binária de He-Ar, isto é, viscosidade e condutividade térmica, também foram calculados para diversas valores da fração molar. Já que o esforço computacional do novo esquema é comparável com o modelo de esferas rígidas, este esquema pode substituir completamente os modelos amplamente utilizados tais como esferas rígidas variáveis e esferas moles variáveis.

A seguir, o escoamento plano de Couette para a mistura gasosa de He-Ar é calculado pelo método DSMC baseado no potencial *ab initio*, ao longo de toda a gama de rarefação de gás para diversos valores da fração molar e para dois valores da velocidade da parede. O menor valor de velocidade é correspondente ao limite quando as condições não lineares são desprezíveis, enquanto o valor maior descreve um escoamento não linear. O tensor de



cisalhamento, gradiente de velocidade, e perfis de temperatura e fração molar são apresentados. Os resultados reportados podem ser utilizados como dados de referência para testar as equações cinéticas modelo de misturas gasosas. Para estudar a influência do potencial intermolecular, são realizadas simulações para o modelo molecular de esfera rígida. Um desvio relativo dos resultados com base nesse modelo daqueles baseados em potencial *ab initio* é observado. Salienta-se que a diferença entre os tensores de cisalhamento dos dois potenciais para a solução linearizada é dentro de 1%, enquanto que atinge 6% para os casos não-lineares.

A seguir, o problema do fluxo de calor para uma mistura gasosa binária confinada entre duas placas paralelas com diferentes temperaturas é estudado em função do método DSMC com uma aplicação do potencial *ab initio*. Os cálculos são feitos para uma ampla gama de rarefação gás, para vários valores da fração molar e para dois valores da diferença de temperatura. O menor valor de diferença de temperatura corresponde ao limite quando os termos não lineares são desprezíveis, enquanto o valor maior descreve uma transferência de calor não-linear. O fluxo de calor, temperatura, e as distribuições de frações molares são apresentados. Para estudar a influência do potencial intermolecular, foram realizadas simulações para o modelo molecular de esfera rígida. Um desvio relativo dos resultados com base nesse modelo daquelas baseadas no potencial *ab initio* é observado. A diferença entre o fluxo de calor dos dois potenciais é de cerca de 8% e 5% para as pequenas e grandes diferenças de temperatura, respectivamente. A distribuição de temperatura entre as placas é fracamente afetada pelo potencial molecular, enquanto que a variação da composição química é a quantidade mais sensível para o problema considerado. Os resultados reportados podem ser utilizados como dados de referência para testar equações cinéticas modelo de misturas gasosas.

Por último, um fluxo de gás rarefeito através de um orifício é calculado para três gases nobres, hélio, argônio e criptônio, aplicando DSMC baseada no potencial *ab initio*. Os cálculos são realizados ao longo de todo o intervalo da rarefação do gás e para vários valores da razão de pressão com o erro

numérico inferior a 0,5%. Uma análise comparativa mostra que a diferença relativa da taxa de fluxo com base no potencial *ab initio* do que a obtida para o modelo molecular de esferas rígidas depende de muitos fatores, isto é, espécies de gás, a razão de pressão, rarefação do gás e a temperatura do gás. Entre os gases considerados aqui, a diferença para o hélio é menor e não excede 0,7%. O desvio para o criptônio é maior e chega a 1,4%. O desvio relativo da taxa de fluxo devido à variação de temperatura está dentro de 0,9%. Uma comparação dos campos mostra que os discos de Mach para o potencial *ab initio* são mais intensos do que aqueles para o modelo de esferas rígidas.

# Agradecimentos

Primeiro de tudo agradeço à Deus pela vida e oportunidade de estar entre os poucos privilegiados que tiveram acesso a educação de alto nível.

Agradeço ao professor Dr. Felix Sharipov, por sua guia e paciência, desde meu período de preparação para ingresso no curso de doutorado, e a amizade que eu acredito ter conquistado após todos esses anos juntos.

Agradeço a minha família, meu pai Lauro (em memória), minha mãe Olívia, meus irmãos Reinaldo, Maria Aparecida e Rogério, e também agradeço aos meus parentes Maria Elisabete, Antônio, Dilvane, Stefani, Lauro Strapasson Neto, Samuel, Joyce, Emanuele Cristina.

Agradeço à CAPES, pela bolsa concedida.

Ao departamento de Física da UFPR (todos os que foram meus professores tanto na graduação como no doutorado) e ao Curso de Pós-Graduação em Física da UFPR.

Aos membros das bancas de Qualificação 1 e 2, que muito contribuíram para a consolidação deste trabalho.

Ao Laboratório Central de Processamento de Alto Desempenho (LCPAD), da UFPR, pelo uso das máquinas.

Aos meus predecessores Denize Kalempa e Dalto V. Kozak.

Às secretárias do curso de Pós-Graduação, Gislaine Klemba e Leila Navarro de Brito.

À todos os meus amigos do curso de pós-graduação em Física, e em especial os colegas de sala e do grupo de pesquisa, e também aos meus amigos e colegas dos tempos de graduação, em especial Carlos Patsko, e à todos aqueles que de uma forma ou de outra ajudaram na realização deste trabalho.

*“Our greatest glory is not in never falling, but in rising every time we fall.”*

Confucius.

Dedicado a meu pai Lauro (em memória) e a minha mãe Olívia.

# Lista de Figuras

1.1	A dinâmica dos gases rarefeitos encontra aplicação na engenharia aeroespacial, em aceleradores de partículas e na microeletrônica. Fotos: a-Tevatron, no Fermilab, fonte wikipedia. b-Concepção artística do satélite SARA, isto é, Satélite de Re-Entrada Atmosférica [18–21], fonte <a href="http://www.iae.cta.br">www.iae.cta.br</a> , e c microchip, fonte <a href="http://infobae.com">infobae.com</a> . . . . .	3
2.1	Esquema de colisão binária. . . . .	16
2.2	Potenciais AI . . . . .	21
3.1	Esquema de transferência de calor. . . . .	27
3.2	Esquema de escoamento Coutte. . . . .	31
3.3	Esquema de orifício. . . . .	35
4.1	Esquema da DSMC . . . . .	42
4.2	Cilindro imaginário. . . . .	45
5.1	Ângulo de deflexão $\chi$ vs parâmetro de impacto $b$ para $T^* = 29,35$ . Publicado originalmente em [37]. . . . .	56
6.1	Perfil aproximado da velocidade para o escoamento Couette. .	61
7.1	Perfil de temperatura para $U/v_0 = 2$ e $C_0 = 0,5$ . Publicado originalmente em [39]. . . . .	82
7.2	Perfis de velocidade para $U/v_0 = 2$ , $C_0 = 0,5$ e vários $\delta$ . . . . .	84
7.3	Perfil de fração molar para $U/v_0 = 2$ e $C_0 = 0,5$ . Publicado originalmente em [39]. . . . .	86

7.4	Temperatura $T/T_0$ vs coordenada $x$ para o potencial AI em $\Delta T/T_0 = 1,5$ , $C_0 = 0,5$ . Publicado originalmente em [40]. . . . .	95
7.5	Temperatura $T/T_0$ vs coordenada $x$ para potencial AI em $\Delta T/T_0 = 0,2$ , $C_0 = 0,5$ . . . . .	96
7.6	Fração molar $C$ vs coordenada $x$ para potencial AI para $\Delta T/T_0 = 1,5$ , $C_0 = 0,5$ . Publicado originalmente em [40]. . . . .	98
7.7	Fração molar $C$ vs coordenada $x$ para potencial AI para $\Delta T/T_0 = 1,5$ , $C_0 = 0,25$ . . . . .	98
7.8	Fração molar $C$ vs coordenada $x$ para potencial AI para $\Delta T/T_0 = 1,5$ , $C_0 = 0,75$ . . . . .	99
7.9	Fração molar $C$ vs coordenada $x$ para potenciais AI e HS para $\Delta T/T_0 = 1,5$ , $C_0 = 0,5$ e $\delta = 40$ . Publicado originalmente em [40].	100
7.10	Fração molar $C$ vs coordenada $x$ para potenciais AI e HS para $\Delta T/T_0 = 1,5$ , $C_0 = 0,75$ e $\delta = 40$ . . . . .	100
7.11	Fração molar $C$ vs coordenada $x$ para potenciais AI e HS para $\Delta T/T_0 = 1,5$ , $C_0 = 0,25$ e $\delta = 40$ . . . . .	101
7.12	Fração molar $C$ vs coordenada $x$ para potenciais AI e HS para $\Delta T/T_0 = 1,5$ , $C_0 = 0,5$ e $\delta = 0,01$ . . . . .	102
7.13	Fração molar $C$ vs coordenada $x$ para potenciais AI e HS para $\Delta T/T_0 = 1,5$ , $C_0 = 0,75$ e $\delta = 0,01$ . . . . .	103
7.14	Fração molar $C$ vs coordenada $x$ para potenciais AI e HS para $\Delta T/T_0 = 1,5$ , $C_0 = 0,25$ e $\delta = 0,01$ . . . . .	104
8.1	Grade numérica e coordenadas. Publicado originalmente em [41].	106
8.2	Desvio relativo $(W_{AI} - W_{HS})/W_{HS}$ da taxa de fluxo $W_{AI}$ baseada no potencial AI e para $T_0 = 300$ K do $W_{HS}$ baseado no modelo HS vs parâmetro de rarefação $\delta$ : (a) $p_1/p_0 = 0,1$ ; (b) $p_1/p_0 = 0,3$ ; (c) $p_1/p_0 = 0,5$ ; (d) $p_1/p_0 = 0,7$ . Publicado originalmente em [41]. . . . .	113

8.3	Desvio relativo $(W_{\text{He}} - W_{\text{Kr}})/W_{\text{Kr}}$ da taxa de fluxo baseado no potencial AI para o Hélio $W_{\text{He}}$ do para o Criptônio $W_{\text{Kr}}$ vs parâmetro de rarefação $\delta$ para $T_0 = 300$ K. Publicado originalmente em [41]. . . . .	114
8.4	Desvio relativo $(W - W_{300})/W_{300}$ da taxa de fluxo baseada no potencial AI para criptônio $W$ para $T_0 = 50$ K e 2000 K do $W_{300}$ correspondente a $T_0 = 300$ K vs parâmetro de rarefação $\delta$ para $p_1/p_0 = 0,7$ . Publicado originalmente em [41]. . . . .	115
8.5	Distribuições de densidade $n/n_0$ , temperatura $T/T_0$ e velocidade hidrodinâmica $u_x/v_0$ ao longo do eixo ( $r = 0$ ) para $\delta = 100$ e $p_1/p_0 = 0,1$ . As distribuições para He e Kr correspondem a $T_0 = 300$ K. Publicado originalmente em [41]. . . . .	117
8.6	Distribuições de densidade $n/n_0$ , temperatura $T/T_0$ e velocidade hidrodinâmica $u_x/v_0$ ao longo do eixo ( $r = 0$ ) para $\delta = 100$ e $p_1/p_0 = 0,3$ . As distribuições para He e Kr correspondem a $T_0 = 300$ K. Publicado originalmente em [41]. . . . .	118
8.7	Distribuições de densidade $n/n_0$ , temperatura $T/T_0$ e velocidade hidrodinâmica $u_x/v_0$ ao longo do eixo ( $r = 0$ ) para $\delta = 100$ e $p_1/p_0 = 0,5$ . As distribuições para He e Kr correspondem a $T_0 = 300$ K. . . . .	119
8.8	Distribuições de densidade $n/n_0$ , temperatura $T/T_0$ e velocidade hidrodinâmica $u_x/v_0$ ao longo do eixo ( $r = 0$ ) para $\delta = 100$ e $p_1/p_0 = 0,7$ . As distribuições para He e Kr correspondem a $T_0 = 300$ K. . . . .	120
8.9	Distribuições de densidade $n/n_0$ e velocidade hidrodinâmica $u_x/v_0$ ao longo do eixo ( $r = 0$ ) para $\delta = 0,1$ e $p_1/p_0 = 0,5$ . As distribuições para He e Kr correspondem a $T_0 = 300$ K. . . . .	121
A.1	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,1$ e $\delta = 0,5$ . . . . .	149



A.2	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,1$ e $\delta = 1$ . . . . .	150
A.3	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,1$ e $\delta = 2$ . . . . .	151
A.4	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,1$ e $\delta = 5$ . . . . .	152
A.5	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,1$ e $\delta = 10$ . . . . .	153
A.6	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,1$ e $\delta = 100$ . . . . .	154
A.7	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,3$ e $\delta = 0,5$ . . . . .	155
A.8	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,3$ e $\delta = 1$ . . . . .	156
A.9	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,3$ e $\delta = 2$ . . . . .	157
A.10	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,3$ e $\delta = 5$ . . . . .	158
A.11	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,3$ e $\delta = 10$ . . . . .	159
A.12	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,3$ e $\delta = 100$ . . . . .	160
A.13	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,5$ e $\delta = 0,5$ . . . . .	161
A.14	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,5$ e $\delta = 1$ . . . . .	162
A.15	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,5$ e $\delta = 2$ . . . . .	163
A.16	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,5$ e $\delta = 5$ . . . . .	164

A.17	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,5$ e $\delta = 10$ . . . . .	165
A.18	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,5$ e $\delta = 100$ . . . . .	166
A.19	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,7$ e $\delta = 0,5$ . . . . .	167
A.20	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,7$ e $\delta = 1$ . . . . .	168
A.21	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,7$ e $\delta = 2$ . . . . .	169
A.22	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,7$ e $\delta = 5$ . . . . .	170
A.23	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,7$ e $\delta = 10$ . . . . .	171
A.24	Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura $T$ e (3) Mach local $M$ para $p_1/p_0 = 0,7$ e $\delta = 100$ . . . . .	172
B.1	Potencial AI para o He de acordo com Ref. [56], av5z vs av5z+. $U$ em $E_h$ (Hartree) e $r$ em unidades de $a_0$ (raio de Bohr). . . .	176
B.2	Potencial AI para o He de acordo com Ref. [56], avqz vs av5z+. $U$ em $E_h$ (Hartree) e $r$ em unidades de $a_0$ (raio de Bohr). . . .	177
B.3	Potencial AI para o He de acordo com Ref. [56], avqz+33221 vs av5z+. $U$ em $E_h$ (Hartree) e $r$ em unidades de $a_0$ (raio de Bohr). . . . .	178
B.4	Potencial AI para o He de acordo com Ref. [56], avtz vs av5z+. $U$ em $E_h$ (Hartree) e $r$ em unidades de $a_0$ (raio de Bohr). . . .	179
B.5	Potencial AI para o He de acordo com Ref. [56], avtz+332 vs av5z+. $U$ em $E_h$ (Hartree) e $r$ em unidades de $a_0$ (raio de Bohr). . . .	180
B.6	Potencial AI para o He de acordo com Ref. [56], avtz+33221 vs av5z+. $U$ em $E_h$ (Hartree) e $r$ em unidades de $a_0$ (raio de Bohr). . . . .	181

B.7	Alguns potenciais AI para o He de acordo com Ref. [56] vs [177](Vol). $U$ em $E_h$ (Hartree) e $r$ em unidades de $a_0$ (raio de Bohr). . . . .	182
B.8	Potenciais para o Ar de acordo com o artigo Ref. [56]. $U$ em $E_h$ (Hartree) e $r$ em unidades $a_0$ (raio de Bohr). . . . .	183

# Lista de Tabelas

2.1	Parâmetros para o potencial AI dado pela Eq.(2.37). . . . .	20
3.1	Resumo da literatura para condutividades térmicas $\kappa$ para mistura He-Ar a 300 K. $C_0$ é a concentração de equilíbrio da mistura.	24
3.2	Valores de referência para condutividade térmica $\kappa$ para mistura He-Ar, a 300 K. . . . .	25
3.3	Viscosidades $\mu$ à 300 K, usando o método de velocidades discretas da Ref. [64]. . . . .	25
3.4	Valores de referência para a viscosidade $\mu$ de uma mistura He-Ar, a 300 K. . . . .	26
3.5	Fluxo de calor adimensional $q$ vs. parâmetro de rarefação $\delta$ e concentração $C_0$ , para potencial realístico (PR) e mistura He-Ar de [77]. O erro numérico reportado é menor que 0,1%. .	30
3.6	Tensão de cisalhamento adimensional $\Pi$ vs. parâmetro de rarefação $\delta$ e concentração $C_0$ , para potencial realístico e mistura He-Ar segundo a Ref. [97]. O erro numérico relativo reportado é menor que 0,1%. . . . .	34
3.7	Fluxo de massa reduzido $W$ através de um orifício. $\Delta W = W_{max} - W_{min}$ . . . . .	38
3.8	Taxa de fluxo reduzida $W$ vs. parâmetro de rarefação $\delta$ e razão de pressão $p_1/p_0$ para esferas rígidas (HS) e esferas rígidas variáveis (VHS), de [125]. O erro numérico reportado é menor que 1%. . . . .	39
5.1	Dados para os problemas de referência . . . . .	57

5.2	Fluxo de calor $q_x$ vs pressão $p$ . CPU é razão de tempos de CPU entre LJ e HS. Gás Hélio. . . . .	59
5.3	Tensor de cisalhamento $P_{xy}$ vs pressão $p$ . CPU é razão de tempos de CPU entre LJ e HS. Gás Hélio. . . . .	59
6.1	Viscosidade $\mu$ da mistura He-Ar vs fração molar $C$ calculados via DSMC, e dados da literatura. . . . .	66
6.2	Dados do cálculo de viscosidade pela DSMC para HS e comparação com viscosidade de referência de [70]. . . . .	66
6.3	Condutividade térmica $\kappa$ da mistura He-Ar vs fração molar $C$ . DSMC e literatura. Os dados de [62, 63, 66] são teóricos, enquanto [54] são empíricos. . . . .	69
6.4	Dados do cálculo de condutividade térmica, DSMC, HS. Viscosidade de referência de $\mu_0$ de [65]. . . . .	69
7.1	Tensor de cisalhamento adimensional $\Pi$ para potencial AI vs parâmetro de rarefação $\delta$ , fração molar de equilíbrio $C_0$ e velocidade da parede $U/v_0 = 0,2$ . <sup>a</sup> Eq.(7.18), <sup>b</sup> Eq.(7.12). . . . .	77
7.2	Tensor de cisalhamento adimensional $\Pi$ para potencial AI vs parâmetro de rarefação $\delta$ , fração molar de equilíbrio $C_0$ e velocidade da parede $U/v_0 = 2$ . <sup>a</sup> Eq.(7.18). <sup>b</sup> Eq.(7.12). . . . .	78
7.3	Propriedades da mistura He-Ar para $T=300$ K. . . . .	78
7.4	Desvio relativo do tensor de cisalhamento $\Pi$ de HS para o de potencial AI vs $\delta$ , $C_0$ e $U/v_0$ . . . . .	79
7.5	Desvio relativo do tensor de cisalhamento $\Pi$ baseado no modelo de McCormack (MC), vide Ref. [97], do para potencial AI vs parâmetro de rarefação $\delta$ e fração molar de equilíbrio $C_0$ para $U/v_0 = 0,2$ . . . . .	79
7.6	Gradiente de velocidade $\nu$ definido em (7.19) para potencial AI vs parâmetro de rarefação $\delta$ e fração molar de equilíbrio $C_0$ para $U/v_0 = 2$ . <sup>a</sup> Eq.(7.20) . . . . .	80

7.7	Desvio relativo do gradiente de velocidade $\nu$ do modelo de HS para o de potencial AI vs parâmetro de rarefação $\delta$ e fração molar de equilíbrio $C_0$ para $U/v_0 = 2$ . . . . .	81
7.8	Temperatura no ponto médio ( $x = 0$ ) para potencial AI vs parâmetro de rarefação $\delta$ e fração molar de equilíbrio $C_0$ para $U/v_0 = 2$ . <sup>a</sup> Eq.(7.17). <sup>b</sup> Eq.(7.8). . . . .	83
7.9	Desvio relativo da temperatura no ponto médio ( $x = 0$ ) para HS daquele para potencial AI vs parâmetro de rarefação $\delta$ e fração molar de equilíbrio $C_0$ para $U/v_0 = 2$ . . . . .	83
7.10	Fração molar $C$ na parede ( $x = H/2$ ) para o potencial AI vs parâmetro de rarefação $\delta$ e fração molar de equilíbrio $C_0$ para $U/v_0 = 2$ . <sup>a</sup> Eq.(7.11). . . . .	85
7.11	Índice de viscosidade $\omega$ vs temperatura baseado nos dados de [54]. . . . .	87
7.12	Fluxo de calor adimensional $q$ para potencial AI vs parâmetro de rarefação $\delta$ , fração molar de equilíbrio $C_0$ e diferença de temperatura $\Delta T/T_0 = 0,2$ . <sup>a</sup> Eq.(7.33), <sup>b</sup> Eq.(7.31). . . . .	92
7.13	Fluxo de calor adimensional $q$ para potencial AI vs parâmetro de rarefação $\delta$ , fração molar de equilíbrio $C_0$ e diferença de temperatura $\Delta T/T_0 = 1,5$ . <sup>a</sup> Eq.(7.33). . . . .	93
7.14	Desvio relativo do fluxo de calor $q$ para HS do para potencial AI vs parâmetro de rarefação $\delta$ , fração molar de equilíbrio $C_0$ e diferença de temperatura $\Delta T/T_0$ . . . . .	94
7.15	Desvio do modelo de McCormack (MC) para PR, veja Ref. [77], daquele para potencial AI vs parâmetro de rarefação $\delta$ , fração molar de equilíbrio $C_0$ para $\Delta T/T_0 = 0,2$ . . . . .	94
7.16	Temperatura $T/T_0$ nas paredes ( $x = \pm H/2$ ) para potencial AI vs fração molar de equilíbrio $C_0$ e parâmetro de rarefação $\delta$ para $\Delta T/T_0 = 1,5$ . <sup>a</sup> Eq.(7.34). <sup>b</sup> Eq.(7.24) . . . . .	97

7.17	Fração molar $C$ nas paredes ( $x = \pm H/2$ ) para potencial AI vs seu valor de equilíbrio $C_0$ e parâmetro de rarefação $\delta$ para $\Delta T/T_0 = 1,5$ . . . . .	101
8.1	Propriedades dos gases e parâmetros da matriz de deflexão. . .	108
8.2	Taxa de fluxo reduzida $W$ para $p_1/p_0 = 0,1$ . . . . .	109
8.3	Taxa de fluxo reduzida $W$ para $p_1/p_0 = 0,3$ . . . . .	110
8.4	Taxa de fluxo reduzida $W$ para $p_1/p_0 = 0,5$ . . . . .	111
8.5	Taxa de fluxo reduzida $W$ para $p_1/p_0 = 0,7$ . . . . .	112
8.6	Alcance de variação de densidade $n/n_0$ , temperatura $T/T_0$ e velocidade hidrodinâmica $u_x/v_0$ no primeiro disco de Mach e sua espessura $d/a$ . . . . .	116
B.1	Parâmetros para o He da Ref. [176] . . . . .	174
B.2	Parâmetros para o He de Ref. [177]. $a_0$ é o raio de Bohr. . . .	175
B.3	Parâmetros para o potencial Ar-Ar HFDIDI do artigo [178]. Nem todos os dígitos mostrados são significativos. . . . .	179
B.4	Parâmetros para o Argônio de Ref. [63]. . . . .	180
B.5	Parâmetros para o Ne de [180] . . . . .	182
B.6	Parâmetros para o Argônio, Criptônio e Xenônio do artigo [179]. Os parâmetros são adimensionais, de modo que as distâncias são em unidades de $r_{\min}$ e as energias em unidade de $\varepsilon$ . . . . .	185

# Lista de Abreviações

DSMC      Simulação Direta de Monte Carlo. Do inglês *Direct Simulation Monte Carlo*.

HS      Esferas rígidas. Do inglês *Hard Sphere*.

VHS      Esferas rígidas variáveis. Do inglês *Variable Hard Sphere*.

VSS      Esferas moles variáveis. Do inglês *Variable Soft Sphere*.

PR      Potencial Realístico.

AI      A partir de primeiros princípios. Do latim *Ab initio*.

LJ      Lennard-Jones.

DGR      Dinâmica dos Gases Rarefeitos.



# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Limites da Mecânica dos meios contínuos . . . . .	1
1.2	Dinâmica dos gases rarefeitos . . . . .	2
1.3	Contextualização deste trabalho . . . . .	4
1.4	Proposta deste trabalho . . . . .	4
1.5	Organização da tese . . . . .	5
1.6	Contribuição da tese . . . . .	6
<b>2</b>	<b>Conceitos de dinâmica dos gases rarefeitos</b>	<b>7</b>
2.1	Livre caminho médio e livre caminho equivalente . . . . .	7
2.2	Número de Knudsen e Parâmetro de Rarefação . . . . .	8
2.3	Distribuição de velocidade e momentos . . . . .	9
2.4	Lei de Newton . . . . .	12
2.5	Viscosidade em gases . . . . .	12
2.6	Lei de Fourier . . . . .	13
2.7	Número de Prandtl . . . . .	13
2.8	Taxa de termodifusão e fator de difusão térmica . . . . .	13
2.9	Número de Mach . . . . .	14
2.10	Equação de Boltzmann . . . . .	14
2.11	Ângulo de deflexão . . . . .	15
2.12	Potencial de esferas rígidas . . . . .	16
2.13	Modelo VHS . . . . .	17

2.14	Potencial Lennard-Jones . . . . .	18
2.15	Potenciais <i>Ab initio</i> . . . . .	19
<b>3</b>	<b>Revisão bibliográfica</b>	<b>22</b>
3.1	Condutividade térmica . . . . .	22
3.1.1	Valores de referência . . . . .	23
3.2	Viscosidade . . . . .	24
3.2.1	Valores de referência . . . . .	26
3.3	Transferência de calor . . . . .	26
3.3.1	Descrição do problema . . . . .	26
3.3.2	Caso de teoria linear para gás único . . . . .	28
3.3.3	Caso da teoria linear para mistura . . . . .	28
3.3.4	Caso da teoria não linear para gás único . . . . .	29
3.3.5	Caso de teoria não linear para mistura . . . . .	29
3.3.6	Valores de referência . . . . .	30
3.4	Escoamento plano de Couette . . . . .	30
3.4.1	Descrição do escoamento de Couette . . . . .	30
3.4.2	Caso da teoria linear para gás único . . . . .	32
3.4.3	Caso da teoria linear para mistura . . . . .	32
3.4.4	Caso da teoria não linear para gás único . . . . .	33
3.4.5	Caso da teoria não linear para mistura . . . . .	33
3.4.6	Valores de referência . . . . .	33
3.5	Escoamento através de orifício . . . . .	34
3.5.1	Descrição do problema . . . . .	34
3.5.2	Revisão da literatura de orifício . . . . .	36
<b>4</b>	<b>O Método da Simulação Direta de Monte Carlo</b>	<b>40</b>
4.1	Métodos de Monte Carlo e a DSMC . . . . .	40
4.2	Passos da DSMC . . . . .	41
4.2.1	Set-up inicial . . . . .	42
4.2.2	Movimento Livre . . . . .	42

4.2.3	Indexação de partículas . . . . .	43
4.2.4	Colisões . . . . .	44
4.2.5	Quantidades macroscópicas . . . . .	48
4.3	Erros . . . . .	51
<b>5</b>	<b>Métodos propostos nesta tese</b>	<b>52</b>
5.1	O método de implementação de potenciais arbitrários na DSMC	52
5.2	Potenciais arbitrários para mistura . . . . .	54
5.3	Esquema numérico . . . . .	55
5.4	Resultados . . . . .	56
<b>6</b>	<b>Coefficientes de transporte</b>	<b>60</b>
6.1	Viscosidade . . . . .	60
6.1.1	Viscosidade e escoamento de Couette . . . . .	60
6.1.2	Viscosidade em gases diluídos . . . . .	62
6.1.3	Determinação da viscosidade através da DSMC . . . . .	63
6.1.4	Resultados . . . . .	65
6.2	Condutividade térmica . . . . .	66
6.2.1	Condutividade térmica em gases diluídos . . . . .	66
6.2.2	Determinação da condutividade térmica através da DSMC	67
6.2.3	Resultados . . . . .	68
<b>7</b>	<b>Fenômenos de transporte através de misturas</b>	<b>70</b>
7.1	Escoamento plano de Couette . . . . .	70
7.1.1	Limite hidrodinâmico . . . . .	70
7.1.2	Regime de molécula livre . . . . .	74
7.1.3	Regime de transição . . . . .	75
7.1.4	Resultados e discussões . . . . .	77
7.2	Fluxo de calor entre duas placas paralelas . . . . .	86
7.2.1	Limite hidrodinâmico . . . . .	87
7.2.2	Regime de molécula livre . . . . .	89
7.2.3	Regime de transição . . . . .	90

7.2.4	Resultados e discussões . . . . .	92
<b>8</b>	<b>Fluxo de gás rarefeito através de orifício</b>	<b>105</b>
8.1	Parâmetros da simulação . . . . .	105
8.2	Resultados e discussões . . . . .	108
<b>9</b>	<b>Conclusões</b>	<b>122</b>
9.1	Potencial arbitrário . . . . .	122
9.2	Potencial <i>ab initio</i> . . . . .	122
9.3	Couette e Transferência de Calor . . . . .	123
9.3.1	Couette . . . . .	123
9.3.2	Transferência de calor . . . . .	125
9.4	Escoamento através de um Orifício . . . . .	126
9.5	Trabalhos futuros . . . . .	127
<b>A</b>	<b>Campos de escoamento de orifício</b>	<b>148</b>
<b>B</b>	<b>Potenciais <i>Ab initio</i></b>	<b>173</b>
B.1	Considerações gerais . . . . .	173
B.2	Potencial para o He . . . . .	173
B.3	Potencial para Ar . . . . .	177
B.4	Potencial para o Neônio . . . . .	181
B.5	Potencial para o Criptônio . . . . .	183
B.6	Potencial para o Xenônio . . . . .	184
B.7	Potencial para He <sub>2</sub> , Ne <sub>2</sub> , Ar <sub>2</sub> , He-Ne, He-Ar e Ne-Ar . . . . .	185
B.8	Potencial para He-Kr, Ne-Kr, Ar-Kr e Kr-2 . . . . .	186

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Limites da Mecânica dos meios contínuos

O principal pressuposto da mecânica dos meios contínuos é que os fluidos são contínuos [1]. Isto quer dizer que a distância média entre as moléculas de um fluido são muito menores do que qualquer tamanho característico do escoamento. As equações de Euler e Navier-Stokes são válidas apenas sob este pressuposto. Estas equações permitem descrever uma grande classe de escoamento de fluidos.

Porém há situações onde o pressuposto do meio contínuo não vale mais [2, 3]. Um dos primeiros a perceber tal situação foi Martin Knudsen [4], em 1909, quando ele detectou um desvio na medida da taxa de fluxo através de um tubo a baixa pressão daquele previsto na equação de Navier-Stokes. Este desvio foi explicado pelo fato que a hipótese do meio contínuo a baixa temperatura não vale. Nesta situação o gás é dito rarefeito. Assim, devido a falha da hipótese do contínuo, a abordagem matemática para escoamentos sob estas circunstâncias precisa ser baseada numa descrição microscópica, ou seja, um gás deve ser considerado como sendo composto de moléculas. Esta abordagem é chamada de Dinâmica dos Gases Rarefeitos.

Foi Daniel Bernoulli, que, no século XVIII, estabeleceu o que é conhecido hoje em dia como a teoria cinética elementar dos gases e mostrou que a pressão é proporcional ao quadrado da velocidade das moléculas. No século

XIX John Herapath [5] e J.J. Waterston [6] mostraram que a temperatura é proporcional à energia das moléculas, e introduziram o teorema de equipartição de energia.

O primeiro a introduzir o conceito de livre caminho médio das moléculas foi Rudolf Clausius [7]. A Dinâmica dos Gases Rarefeitos propriamente dita teve o seu início a partir das ideias lançadas por Maxwell, que em 1859 abandonou a ideia de que todas as partículas de gás moviam-se com a mesma velocidade, e assumiu que uma distribuição estatística de velocidades deve existir, introduzindo o conceito de função distribuição de velocidade. Ele obteve uma distribuição no estado de equilíbrio do gás, e tal distribuição é conhecido como distribuição de Maxwell. Em 1872, Boltzmann obteve a equação cinética [3, 8], que permite determinar a evolução da função de distribuição de velocidade quando o sistema está fora de equilíbrio. A partir dessas ferramentas matemáticas, vários métodos para o cálculo dos fluxos de gases rarefeitos foram desenvolvidos.

## 1.2 Dinâmica dos gases rarefeitos

A dinâmica dos gases rarefeitos [3, 9–17] é a parte da mecânica dos fluidos [1, 2], que estuda gases onde o tamanho característico do escoamento é da ordem do livre caminho médio das moléculas. Nesse caso os gases não formam mais um meio contínuo, e por isso as equações da Mecânica dos meios contínuos, tais como as equações de Euler e Navier-Stokes, não valem mais. Isso ocorre quando a pressão é muito baixa ou quando as dimensões características do escoamento são muito pequenas. Nesse caso, é preciso usar outros métodos, como por exemplo os métodos que envolvem soluções ou aproximações da Equação de Boltzmann ou a Simulação Direta de Monte Carlo.

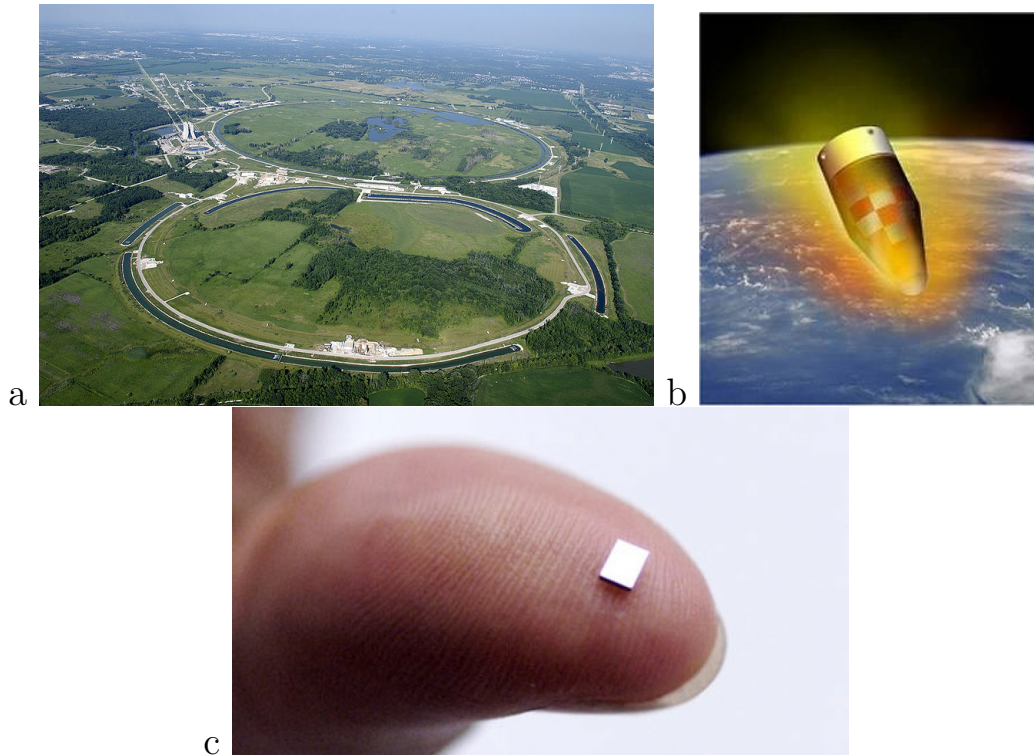


Figura 1.1: A dinâmica dos gases rarefeitos encontra aplicação na engenharia aeroespacial, em aceleradores de partículas e na microeletrônica. Fotos: a-Tevatron, no Fermilab, fonte wikipedia. b-Concepção artística do satélite SARA, isto é, Satélite de Re-Entrada Atmosférica [18–21], fonte [www.iae.cta.br](http://www.iae.cta.br), e c microchip, fonte [infobae.com](http://infobae.com)

Dentre as inúmeras aplicações da Dinâmica de Gases Rarefeitos, vide figura 1.1, estão a Aerotermodinâmica de espaçonaves e satélites, [20–24], projetos como o KATRIN do inglês Karlsruhe Tritium Neutrino Experiment, que visa a medida da massa do neutrino [25–27], aceleradores de partículas [28,29], problemas de metrologia [30–32] e ciência de vácuo [33,34], escoamentos em escalas micro e nano [35,36], etc. No caso da aerotermodinâmica ocorre que os gases que compõem a atmosfera em elevadas altitudes são rarefeitos, não formando um contínuo. No caso do projeto KATRIN o uso da DGR é devido ao vácuo, ou seja, baixa pressão.

## 1.3 Contextualização deste trabalho

A Simulação Direta de Monte Carlo (DSMC) é um dos métodos usados na Dinâmica de Gases Rarefeitos. Os outros métodos são baseados na solução da Equação cinética de Boltzmann. Antes deste trabalho, a simulação DSMC era usada apenas com modelo molecular de esferas rígidas ou com modelos criados especificamente para ela, que envolvem parâmetros de ajuste, como por exemplo, o de esferas rígidas variáveis. Foi nesse contexto que surgiu a necessidade de se criar um método que permitisse utilizar qualquer potencial na DSMC, e de preferência potenciais que não tivessem parâmetros de ajuste, como é o caso do VHS. No capítulo 4, sobre Metodologia, iremos explicar o que é VHS.

## 1.4 Proposta deste trabalho

Foram três as propostas deste trabalho de pesquisa de tese:

1. A criação de um novo método que permitisse o uso de potenciais arbitrários no método DSMC, tais como Lennard-Jones, e em especial potenciais *ab initio* (AI). Os potenciais AI são obtidos a partir de princípios básicos e, portanto, não requerem parâmetros de ajuste, podendo substituir em praticamente todas as situações os principais modelos aproximados utilizados na DSMC, tais como esferas rígidas, esferas rígidas variáveis, esferas moles variáveis, etc. cremos que esse objetivo foi alcançado e a metodologia obtida foi publicada em dois artigos: O primeiro [37] que tratou de potencial arbitrário através do pré cálculo do ângulo de espalhamento  $\chi$  que depende das energias relativas entre as moléculas e do parâmetro de impacto, que é armazenado numa matriz na memória do computador e onde esses dois parâmetros são discretizados na forma de linhas e colunas da matriz. O segundo [38] que implementou de fato o potencial *ab initio*.



2. O cálculo de dois coeficientes de transporte, a saber, a viscosidade e a condutividade térmica, que pela primeira vez foram calculados para mistura de gases nobres (He e Ar) rarefeitos a partir de primeiros princípios (*ab initio*), e que fez parte também do segundo artigo.
3. O uso do método desenvolvido para solucionar problemas com o objetivo de termos dados de referência. Foram resolvidos 3 problemas de referência, a saber, de escoamento plano de Couette, para mistura binária de gases nobres rarefeitos, publicado no artigo [39], de fluxo plano de calor, também para mistura binária de gases nobres rarefeitos, publicado no artigo [40], (os problemas de transferência de calor e de Couette foram resolvidos tanto para o caso linear, quer dizer, para pequena diferença de temperatura e pequena velocidade da parede, em relação à temperatura de equilíbrio e à velocidade mais provável, como também para o caso não linear) e de escoamento através de orifício, para único gás nobre, rarefeito, publicado no artigo [41].

## 1.5 Organização da tese

Esta tese se divide nos seguintes capítulos: Este capítulo fala um pouco sobre o que é a Mecânica dos meios contínuos, e fazemos a contextualização do trabalho, proposta do trabalho, esta organização e a contribuição do trabalho. Segue o capítulo 2 de conceitos básicos e o capítulo 3 de revisão bibliográfica. O capítulo 4 trata sobre Metodologia, onde explicamos qual foi o método utilizado para fazer os cálculos apresentados nesta tese. O capítulo 5 fala sobre os métodos introduzidos nesta tese, isto é, sobre o uso de potenciais intermoleculares arbitrários na DSMC, com ênfase nos potenciais *ab initio*, e como isso foi implementado. No capítulo 6 apresentamos as informações do cálculo dos coeficientes de transporte para mistura e no capítulo 7 as informações sobre o cálculo dos problemas de escoamento de Couette e de fluxo plano de calor, para uma mistura gasosa rarefeita, utilizando o método

de potencial AI. No capítulo 8 falamos sobre escoamento de um gás único rarefeito por orifício utilizando potenciais AI para dois gases diferentes e no capítulo 9 apresentamos as conclusões. Ao final apresentamos dois apêndices, sendo que no apêndice A mostramos os gráficos de campos de temperatura, densidade numérica e número de Mach local para escoamento de orifício, para o gás Argônio, usando potencial AI, para diversas razões de pressão e rarefações. No apêndice B é apresentada uma pequena revisão bibliográfica de potenciais AI.

## 1.6 Contribuição da tese

O trabalho de pesquisa desta tese deu origem a 5 publicações em periódicos internacionais com referees, uma apresentação oral por parte do aluno no congresso internacional “19th International Vacuum Conference”, em Paris, em 2013, além de outras apresentações. A principal contribuição deste trabalho foi a apresentada nos dois primeiros artigos [37, 38]. O primeiro tratando da implementação de potenciais arbitrário em DSMC, e o segundo tratando da implementação de potencial AI, como caso particular do primeiro. Estes dois artigos representaram um grande avanço na área de DSMC. Agora o pesquisador que quiser poderá utilizar os potenciais mais exatos existentes, e sem uso de parâmetros de ajuste tirados da experiência. Os artigos seguintes [39–41] trataram da aplicação deste método para misturas para escoamento plano de Couette e para transferência plana de calor, e para gás único, escoamento de orifício. Estes artigos, portanto, foram para fornecer dados de “benchmark”. Eles podem servir para testar modelos e métodos aproximados, como, por exemplo, McCormack, e para verificar potenciais e modelos cinéticos que visam a simplificação do cálculo.

## Capítulo 2

# Conceitos de dinâmica dos gases rarefeitos

Neste capítulo iremos apresentar de forma resumida alguns conceitos da dinâmica de gases rarefeitos. Quando necessário, esses conceitos serão explicados de forma mais aprimorada ao longo deste trabalho.

### 2.1 Livre caminho médio e livre caminho equivalente

Chama-se de Livre Caminho Médio  $\lambda$  a distância média percorrida por uma molécula entre duas colisões sucessivas. Porém quando temos um potencial de longo alcance, a definição de colisão fica ambígua, porque como o potencial vai até o infinito todas as partículas estão o tempo todo em colisão. Ao invés dele é preferível utilizar o conceito de Livre Caminho Equivalente [42], por não ter ambiguidade e por ser definido somente em termos de grandezas macroscópicas, definido por

$$\ell := \frac{\mu v_0}{p_0}, \quad (2.1)$$

onde,  $p_0$  é a pressão do gás,  $\mu$  é a viscosidade e  $v_0$ , que para gás único é a

velocidade mais provável das moléculas do gás, é definida por

$$v_0 := \sqrt{\frac{2k_B T_0}{m}}, \quad (2.2)$$

$k_B$  é a constante de Boltzmann,  $T_0$  é a temperatura de equilíbrio do gás e  $m$  a massa das moléculas constituintes do gás. Para uma mistura binária  $v_0$  não é mais a velocidade mais provável, mas apenas uma velocidade característica e  $m$  é a massa média definida por

$$m := C m_1 + (1 - C) m_2, \quad (2.3)$$

onde  $C$  é a fração molar da espécie 1, que vale

$$C = \frac{n_1}{n_1 + n_2}, \quad (2.4)$$

e  $n_1$  e  $n_2$  são as densidades numéricas de cada espécie.

## 2.2 Número de Knudsen e Parâmetro de Rarefação

O número de Knudsen ( $\text{Kn}$ ) é um número usado para caracterizar numericamente a rarefação. Ele é definido como

$$\text{Kn} := \frac{\lambda}{H}, \quad (2.5)$$

onde  $\lambda$  é o livre caminho médio das moléculas do gás ou gases e  $H$  é uma distância característica do escoamento, que é escolhida de forma diferente para cada caso. Por exemplo, no escoamento plano de Couette,  $H$  é a distância entre as placas.

O parâmetro de rarefação ( $\delta$ ) é também uma quantidade adimensional que serve para medir o grau de rarefação de um gás. Ele é definido em termos de grandezas macroscópicas, da seguinte forma

$$\delta := \frac{H}{\ell}, \quad (2.6)$$

onde  $\ell$  é o livre caminho equivalente. Pode-se mostrar que ele se relaciona com  $\text{Kn}$  por

$$\delta \propto \frac{1}{\text{Kn}}. \quad (2.7)$$

Com o parâmetro de rarefação  $\delta$  podemos dividir a rarefação de um gás em basicamente três regimes, a saber: (i) Regime de moléculas livres. Nesse regime o gás é extremamente rarefeito e praticamente não ocorrem colisões entre as moléculas do gás, nesse caso temos  $\delta \ll 1$ . (ii) Regime hidrodinâmico  $\delta \gg 1$ , onde a rarefação é mínima e o gás se comporta como um contínuo e, portanto, valem as equações da mecânica dos meios contínuos. (iii) Regime de transição, onde  $\delta \sim 1$ , onde há colisões, mas o gás não forma um contínuo e nem as equações da dinâmica dos meios contínuos são válidas. Problemas de DGR, no regime de transição, em geral não possuem soluções analíticas, e são os mais interessantes para aplicarmos os métodos da dinâmica dos gases rarefeitos, sendo que alguns desses métodos, em especial a DSMC, são válidos em praticamente todos os regimes (exceto para gases densos, onde podem ocorrer colisões ternárias, quaternárias, etc, entre as moléculas do gás). O significado exato de “muito maior” e “muito menor” que a unidade varia de problema para problema e depende também da precisão desejada.

O parâmetro de rarefação é muito utilizado na literatura, assim iremos preferir o parâmetro de rarefação ao número de Knudsen.

## 2.3 Distribuição de velocidade e momentos

Para descrever o movimento das partículas de um gás nós precisamos de no mínimo seis grandezas por partícula, a saber: o vetor posição  $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)$  e o vetor velocidade  $\mathbf{v} = (v_1, v_2, v_3)$ . Formalmente, nós podemos considerar um espaço de seis dimensões de posição e velocidade  $(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ . Denotemos por  $d^6N$  o número de partículas esperado num elemento de volume de seis dimensões  $d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{v}$  próximo ao ponto  $(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ . A função distribuição de

velocidade  $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$  é definida como

$$f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) = \frac{d^6 N}{d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{v}}. \quad (2.8)$$

Além da suposição sobre o grande número de partículas, na definição acima dada, mais uma suposição, a saber, a ausência de correlação no movimento das partículas. Em outras palavras, as partículas estão em um movimento livre de forma independente uma da outra durante praticamente todo o tempo. Uma partícula é submetida a uma interação com outra somente durante um tempo muito curto. Tal condição se cumpre se a distância média entre as partículas é muito maior do que seus tamanhos.

A função distribuição de velocidade contém toda a informação sobre um determinado escoamento de gás. A chamada distribuição de velocidade de Maxwell corresponde a um estado de equilíbrio e para um sistema tridimensional, é dada por

$$f^M(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) = n \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left[ -\frac{mv^2}{2k_B T} \right], \quad (2.9)$$

onde  $T$  é a temperatura. Esta distribuição é obtida da distribuição de Maxwell-Boltzmann, que dá a probabilidade para uma determinada energia, apenas fazendo a substituição  $E = mv^2/2$ . Para uma mistura, cada espécie terá sua própria função distribuição  $f_i(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ , onde  $i$  denota a espécie.

Podemos agora definir algumas grandezas.

A densidade numérica de um gás único é definida como

$$n := \frac{dN}{dV} = \frac{d^3 N}{d^3 \mathbf{r}} = \int f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v}. \quad (2.10)$$

Para uma mistura de  $K$  elementos, temos simplesmente

$$n := \sum_{i=1}^K n_i, \quad (2.11)$$

onde  $n_i$  é a densidade numérica de cada espécie, e a densidade de massa

$$\rho := \sum_{i=1}^K \rho_i = \sum_{i=1}^K n_i m_i. \quad (2.12)$$

A média  $\bar{\psi}_i$  de uma função  $\psi$  das velocidades moleculares para moléculas do tipo  $i$  é dada por

$$n_i \bar{\psi}_i := \int f_i \psi_i d^3 v_i. \quad (2.13)$$

A média para a mistura é definida pela relação

$$n \bar{\psi} := \sum_i n_i \bar{\psi}_i = \sum_i \int f_i \psi_i d^3 v_i. \quad (2.14)$$

A velocidade hidrodinâmica  $\mathbf{u}$  é definida por

$$\rho \mathbf{u} := \sum_i \rho_i \mathbf{v}_i = \sum_i m_i \int f_i \mathbf{v}_i d^3 \mathbf{v}_i. \quad (2.15)$$

Define-se a velocidade peculiar  $\mathbf{V}_i$  de uma molécula do tipo  $i$  em relação à velocidade hidrodinâmica, como sendo

$$\mathbf{V}_i = \mathbf{v}_i - \mathbf{u}. \quad (2.16)$$

Em termos disso, o tensor pressão e o vetor fluxo de calor são definidos como

$$\mathbf{P} := \sum_i m_i \int \mathbf{V}_i \mathbf{V}_i f_i d^3 \mathbf{v}_i, \quad (2.17)$$

e

$$\mathbf{q} := \sum_i \frac{1}{2} m_i \int V_i^2 \mathbf{V}_i f_i d^3 \mathbf{v}_i. \quad (2.18)$$

A pressão hidrostática  $p$  em qualquer ponto do gás é

$$p := \frac{1}{3} (P_{11} + P_{22} + P_{33}), \quad (2.19)$$

e a temperatura  $T$  do gás é dada por

$$\frac{3}{2} n k_B T = \sum_i \frac{1}{2} m_i \int V_i^2 f_i d^3 \mathbf{v}_i. \quad (2.20)$$

## 2.4 Lei de Newton

A lei de Newton que relaciona o gradiente da velocidade com o tensor pressão tem a forma

$$\mathbf{P} = p\mathbf{I} - 2\mu\mathbf{S}, \quad (2.21)$$

onde  $\mu$  é a viscosidade,  $\mathbf{I}$  é o tensor identidade, e  $\mathbf{S}$  é chamado tensor taxa de cisalhamento definido como

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (2.22)$$

Nem todos os fluidos obedecem essa lei. Os fluidos que a obedecem são chamados de fluidos newtonianos, enquanto os que não a obedecem são chamados de não newtonianos.

A lei de Newton vale somente no regime hidrodinâmico, quer dizer, quando  $\delta \gg 1$ , e o gás (ou gases) forma um meio contínuo.

A viscosidade,  $\mu$ , é o coeficiente de proporcionalidade que aparece na lei de Newton. A unidade de viscosidade no SI é o pascal segundo.

## 2.5 Viscosidade em gases

A viscosidade em gases foi primeiramente estudada por Maxwell (1831, 1879), quem descobriu em 1866 que a mesma é proporcional à densidade  $\rho$  do gás, ao livre caminho médio  $\lambda$  das moléculas e à velocidade mais provável  $v_0$  das moléculas que constituem o gás. Isso é a lei de Maxwell de viscosidade dos gases,

$$\mu = \frac{1}{3} \rho \bar{\lambda} v_0. \quad (2.23)$$

Uma consequência direta dessa lei é que a viscosidade é independente da pressão. Por exemplo, um aumento da densidade causado por um aumento da pressão à temperatura constante, será compensado por uma igual redução no livre caminho médio. A viscosidade, porém, depende da temperatura, e cresce com o aumento da mesma.



## 2.6 Lei de Fourier

A lei de Fourier estabelece que o fluxo de calor  $\mathbf{q}$  num meio material é proporcional ao gradiente de temperatura

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T. \quad (2.24)$$

Da mesma forma que a lei de Newton, a lei de Fourier vale somente no regime hidrodinâmico. A constante de proporcionalidade  $\kappa$  que aparece na lei de Fourier é chamada de condutividade térmica. A unidade de condutividade térmica no sistema internacional é o W/(K m). Ela depende da pressão e da temperatura.

## 2.7 Número de Prandtl

Número de Prandtl (Pr) é um número adimensional, que frequentemente aparece nas soluções de problemas da DGR, definido como o produto da viscosidade pelo calor específico à pressão constante dividido pela condutividade térmica. Um valor de Pr muito pequeno significa que o calor se difunde muito rapidamente comparado com o movimento do gás, e vice-versa.

$$\text{Pr} = \frac{\mu c_p}{\kappa}. \quad (2.25)$$

O número de Prandtl, para um gás único, isto é, gás composto de uma única espécie química, vale aproximadamente 2/3.

## 2.8 Taxa de termodifusão e fator de difusão térmica

Se uma mistura em repouso é sujeita a um gradiente de temperatura  $\partial T/\partial x$ , então um gradiente de fração molar  $C$  é estabelecido, o qual é relacionado com o gradiente de temperatura como

$$\frac{\partial C}{\partial x} = - \left( \frac{k_T}{T} \right) \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (2.26)$$

onde  $k_T$  é o coeficiente de taxa de termodifusão. Em vez deste coeficiente, muitas vezes se trabalha em termos do fator de difusão térmica definido como

$$\alpha_T := \frac{k_T}{C(1 - C)}. \quad (2.27)$$

## 2.9 Número de Mach

O número de Mach ( $M$ ) [1] é uma quantidade adimensional igual a razão de uma velocidade, no nosso caso de dinâmica de gases rarefeitos, a velocidade do fluido, pela velocidade do som no mesmo fluido, ou seja,

$$M := \frac{u}{v_{\text{som}}}. \quad (2.28)$$

Se o número de Mach for superior a um ( $M > 1$ ) diz-se que se está no regime supersônico, enquanto que se o número de Mach for inferior a um ( $M < 1$ ) diz-se que se está no regime subsônico. Também existe o conceito de número de Mach local ( $M_{\text{local}}$ ) que é o número de Mach calculado considerando a velocidade do som num determinado ponto do fluido em questão.

## 2.10 Equação de Boltzmann

A equação de Boltzmann é uma equação derivada por Ludwig Boltzmann em 1872 que descreve a evolução temporal de um sistema termodinâmico fora do equilíbrio e é usada, em particular, para os problemas da Dinâmica dos Gases Rarefeitos. Resolvendo a equação de Boltzmann para um determinado problema, o que não é fácil e nem sempre é possível, obtêm-se, em princípio, a distribuição de velocidades das partículas do sistema  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ .

Na ausência de forças externas, a equação de Boltzmann pode ser escrita [3, 43–45], como

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_r f = Q(f, \mathbf{v}), \quad (2.29)$$

onde  $\nabla_r$  é o operador diferencial nabla comum, definido como

$$\nabla_r := \mathbf{e}_i \frac{\partial}{\partial r_i}, \quad (2.30)$$

sendo  $\mathbf{e}_i$  os versores cartesianos, de modo que  $\nabla_r f$  é o gradiente da função distribuição. Estamos assumindo a convenção da soma. O produto escalar  $\mathbf{v} \cdot \nabla_r f$  é dado por

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_r f = v_i \frac{\partial f}{\partial r_i}. \quad (2.31)$$

O termo  $Q(f, \mathbf{v})$ , que não iremos escrever explicitamente, é chamado de integral de colisões e depende de  $f$  e da velocidade molecular, e contém informações sobre o tipo de potencial utilizado.

Bhatnagar, Gross and Krook [46], Welander [47], Shakhov [48] e McCormack [49] criaram equações modelo que são métodos que visam simplificar a resolução da Equação de Boltzmann através de uma aproximação da integral de colisões, isto é, o termo do “lado direito” da equação de Boltzmann. Comparado com a resolução computacional direta da equação de Boltzmann, ou com a DSMC, os métodos numéricos que utilizam essas aproximações podem ser muito mais rápidos, embora esse métodos dêem somente resultados aproximados. Em particular, o método de McCormack, consiste em considerar a função distribuição como sendo uma perturbação da distribuição de Maxwell.

## 2.11 Ângulo de deflexão

A determinação do ângulo de deflexão num campo de força central constitui um problema de mecânica clássica. Considere uma colisão entre duas moléculas, onde uma é o alvo e a outra é o projétil, e  $U(r)$  é o potencial intermolecular, vide figura 2.1. O ângulo de deflexão  $\chi$  depende de dois fatores, a energia relativa  $E$  e o parâmetro de impacto  $b$ , vide figura 2.1. De acordo com [50],  $\chi$  é dado por

$$\chi(b, E) = \pi - 2 \int_{r_m}^{\infty} \frac{bdr}{r \sqrt{r^2 \left(1 - \frac{U(r)}{E}\right) - b^2}}, \quad (2.32)$$

onde  $r_m$  é a distância de máxima aproximação. Essa grandeza é muito importante, porque é em termos dela que se calcula as novas velocidades pós colisionais das partículas, que é necessário na DSMC.

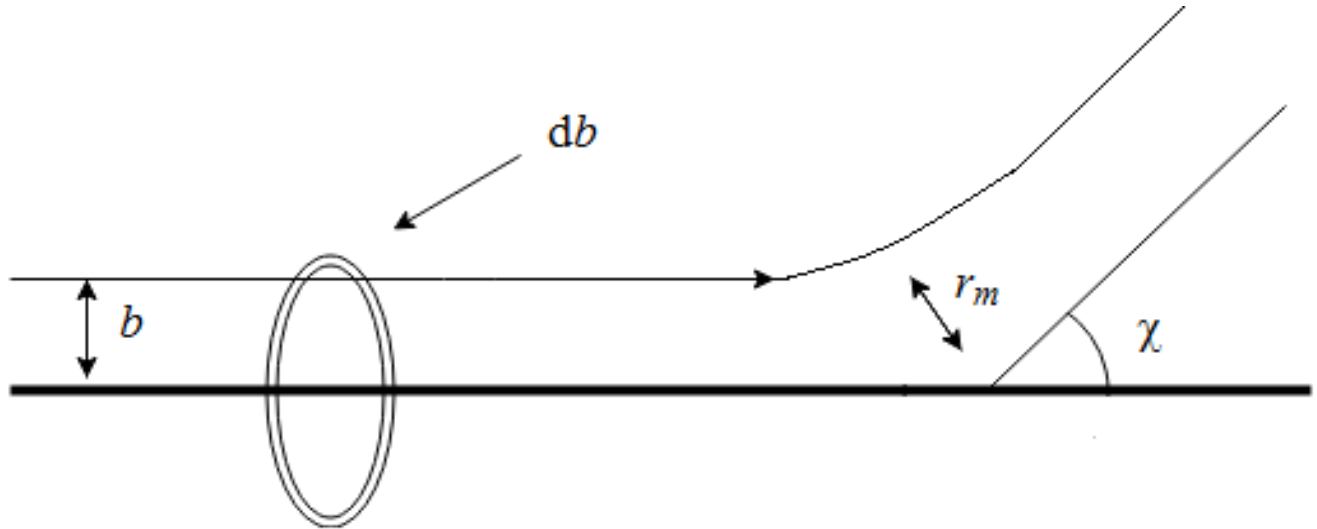


Figura 2.1: Esquema de colisão binária.

## 2.12 Potencial de esferas rígidas

O potencial de esferas rígidas (HS), do inglês hard spheres, é um potencial onde as moléculas são concebidas como sendo esferas rígidas de um determinado diâmetro definido. Quando duas esferas não estão em contato não existe força alguma entre elas. Se duas esferas entram em contato surge uma força infinita que as tornam totalmente intransponíveis. Supondo um único gás e  $d$  o diâmetro das moléculas e  $r$  a distância entre os centros das moléculas, então o potencial é

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & r \leq d \\ 0, & r > d. \end{cases} \quad (2.33)$$

Para uma mistura,  $d$  passa a ser o diâmetro médio das duas espécies.

Por sua simplicidade o potencial de esferas rígidas é um dos mais utilizados, ainda que esteja muito longe de descrever corretamente as forças intermoleculares.

Fisicamente, ele significa que duas partículas não podem ficar mais próximas do que o seu diâmetro, mas quando eles estão separados por uma distância  $r > d$  a força de interação é zero. Em muitas aplicações este modelo funciona muito bem e é por isso que é amplamente utilizado em cálculos práticos, como modelagem de processos tecnológicos, cálculos de engenharia, etc. Os diâmetros moleculares podem ser extraídos a partir dos coeficientes de transporte, tais como a viscosidade e a condutividade térmica.

No caso do gás diluído, as interações intermoleculares não afetam as equações de estado e de energia, mas são importantes para descrever os fenômenos de transporte em gases, ou seja, viscosidade, condutividade térmica, transferências de massa, calor e momento.

## 2.13 Modelo VHS

O modelo VHS, do inglês “Variable Hard Spheres”, foi introduzido por G. A. Bird especificamente na DSMC, vide [51], para levar em conta uma força de repulsão entre as moléculas, coisa que não existe no modelo de esferas rígidas, exceto para  $r = d$ . O modelo HS resulta numa dependência da viscosidade com a temperatura da forma  $\mu \propto \sqrt{T}$ , o que não é confirmado pela experiência, e o modelo VHS corrige isso. O modelo VHS corresponde ao potencial chamado de centro de repulsão, onde a força de repulsão tem a forma

$$F(r) = kr^{-\eta}, \quad (2.34)$$

onde  $\eta$  é uma constante que depende do gás, chamada de coeficiente de viscosidade. Neste modelo o diâmetro das moléculas varia e é dado por

$$d = d_{\text{ref}} \left( \frac{v_r}{v_{r,\text{ref}}} \right)^{-\xi}, \quad (2.35)$$

onde  $\xi = 2/(\eta - 1)$ ,  $v_r$  é a velocidade relativa e os outros valores são constantes de referência. Ou seja, o diâmetro das moléculas varia com a velocidade relativa entre elas. Este modelo evidentemente não é físico, uma vez que

moléculas não variam de tamanho com a velocidade relativa. Neste modelo o ângulo de espalhamento é isotrópico e calculado da mesma forma que no caso de HS. Este modelo requer mais parâmetros de ajuste tirados da experiência do que o modelo HS. Os autores Koura e Matsumoto [52, 53] mostraram que neste modelo o coeficiente de difusão do gás é inconsistente com a experiência, o que levou a criação do chamado modelo de Esferas Moles Variáveis, que é uma extensão do VHS.

## 2.14 Potencial Lennard-Jones

O potencial de Lennard-Jones (LJ) é um potencial que possui tanto uma parte atrativa quanto uma parte repulsiva. A forma convencional dele é

$$U(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{d}{r} \right)^{12} - \left( \frac{d}{r} \right)^6 \right]. \quad (2.36)$$

Além desta, outras formas, com outros expoentes ao invés de 12 e 6 também são possíveis. O termo positivo corresponde à parte repulsiva, e o termo negativo corresponde à parte atrativa. Este potencial tem apenas dois parâmetros, uma distância  $d$ , que é relacionada ao diâmetro molecular; e uma energia  $\epsilon$ , que são parâmetros normalmente extraídos da experiência. Para uma distância grande  $r \gg d$  a força atrativa predomina. A medida que a distância diminui, a parte repulsiva começa a se tornar mais importante. Este potencial é muito utilizado e descreve bem as forças intermoleculares, exceto para a parte repulsiva, que não é íngreme o suficiente, vide [3]. Uma outra dificuldade é que como os parâmetros são extraídos normalmente da experiência fica muito difícil calculá-los corretamente para uma mistura. O que se faz nesse caso, vide [2], é considerar o parâmetro  $\epsilon$  como sendo uma média geométrica dos parâmetros  $\epsilon$  dos componentes, e no caso do parâmetro  $d$ , uma média aritmética, porém isso carece de justificativa.

Como será mostrado depois, a viscosidade  $\mu$  de um gás composto de esferas rígidas é proporcional à raiz quadrada da temperatura, ou seja,  $\mu \propto \sqrt{T}$ ,

enquanto os dados empíricos, ver por exemplo [54], indicam uma dependência diferente. Já o modelo LJ é livre do defeito da viscosidade errada em função da temperatura e descreve mais detalhadamente os coeficientes de transporte.

Este potencial de LJ permite descrever melhor a dependência dos coeficientes de transporte com a temperatura. Os valores de  $d$  e  $\varepsilon$  variam de uma fonte bibliográfica para outra, porque são extraídos de diferentes coeficientes como viscosidade ou condutividade térmica. Alguns valores numéricos dos parâmetros do potencial LJ extraídos de dados experimentais da viscosidade são reportados em [3] e [2].

## 2.15 Potenciais *Ab initio*

*Ab initio*, que abreviaremos por AI, é um termo latino que significa “desde o princípio” e é derivado do latim *ab* (“de”) + *initio*, ablativo singular de *initium* (“início”). Potencial AI significa “potencial desde o início”, desde o básico. Nos potenciais AI não há utilização da experimentação a fim de determinar as forças entre as moléculas. As forças entre as moléculas são calculadas através da Lei de Coulomb e da Mecânica Quântica e os únicos parâmetros utilizados são as constantes fundamentais da Física, tais como a carga elementar, a permissibilidade do vácuo e constante de Planck, e claro, algumas informações básicas sobre as moléculas ou átomos, como o número atômico de um determinado átomo. Estes são os únicos dados experimentais utilizados nos cálculos de potenciais *ab initio*, e são conhecidos com precisão muito alta. Assim, em comparação com os experimentos para determinar empiricamente as forças intermoleculares, podemos dizer que potenciais AI não dependem de dados experimentais. Esta é a grande vantagem deste tipo de cálculo. Em dados experimentais sempre haverá incertezas. O resultado numérico é normalmente extrapolado numa fórmula matemática que permite o uso desses potenciais em outros problemas. Potenciais AI foram introduzidos na DSMC por Sharipov e Strapasson (2012), que constitui o principal assunto desta tese.

Para a primeira implementação do potencial AI na DSMC nós utilizamos a seguinte expressão dada na literatura [55]

$$U(r) = E_h \left[ A e^{-a_1 R - a_2 R^2} - \sum_{n=3}^8 \frac{C_{2n}}{R^{2n}} \left( 1 - e^{-bR} \sum_{k=0}^{2n} \frac{(bR)^k}{k!} \right) \right], \quad R = \frac{r}{a_0}, \quad (2.37)$$

vide apêndice B, que é uma interpolação de dados numéricos, e onde  $E_h = 4,35974417 \times 10^{-18}$  J é a energia de Hartree, e  $a_0 = 5,2917721092 \times 10^{-11}$  m é o raio de Bohr. Os parâmetros do potencial  $A$ ,  $a_1$ ,  $a_2$  e  $b$  são extraídos das últimas colunas das Tabelas III, IX e XIII da Ref. [56]. Os coeficientes  $C_n$  são extraídos das tabelas correspondentes da Ref. [56]. Os valores de todos os parâmetros dos potenciais estão resumidos na Tabela 2.1.

Tabela 2.1: Parâmetros para o potencial AI dado pela Eq.(2.37).

	He, Ref. [56]	Ar, Ref. [56]	He-Ar [56]	Kr, Ref. [57]
$A$	6,62002	82,9493	23,1693	109,66
$a_1$	1,88553	1,45485	1,63329	1,32512
$a_2$	0,0639819	0,0379929	0,0462008	0,0404
$b$	1,85822	1,62365	1,63719	1,40
$C_6$	1,46098	63,7520	9,38701	120,14
$C_8$	14,1179	1556,46	165,522	3565,02
$C_{10}$	183,691	49437,9	3797,16	364467,0
$C_{12}$	$3,26527 \times 10^3$	$1,16518 \times 10^5$	$1,16518 \times 10^5$	0
$C_{14}$	$7,64399 \times 10^4$	$4,66258 \times 10^6$	$4,66258 \times 10^6$	0
$C_{16}$	$2,27472 \times 10^6$	$7,24772 \times 10^9$	$2,36861 \times 10^8$	0
$r_0/a_0$	5,007	6,375	5,8921	6,790
$\epsilon/k_B$ (K)	10,631	139,53	29,7296	199,4

Além disso, a distância  $r_0$  corresponde ao valor onde o potencial é nulo, i.e.  $U(r_0) = 0$ , e as profundidades dos potenciais, i.e.  $\epsilon = -\min\{U\}$ , são dadas na tabela 2.1.

A figura 2.2 mostra duas curvas típicas de potencial AI para Hélio. Como pode-se ver, é bastante semelhante a LJ.



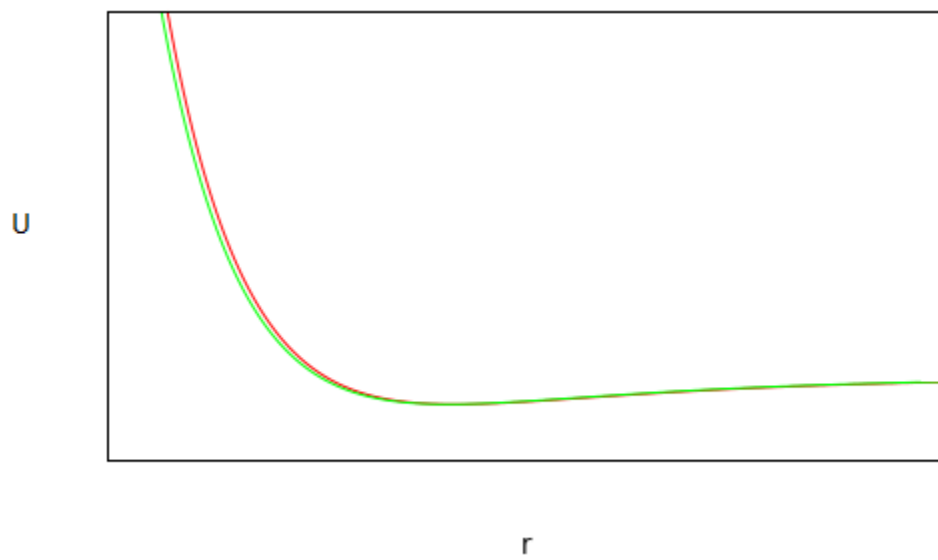


Figura 2.2: Potenciais AI

# Capítulo 3

## Revisão bibliográfica

Neste capítulo iremos fazer breves resenhas sobre os principais resultados publicados sobre viscosidade, condutividade térmica, transferência de calor e escoamento de Couette, para mistura de hélio e argônio, e para escoamento através de orifício de gás único rarefeito.

### 3.1 Condutividade térmica

Os seguintes autores apresentaram expressões analíticas para condutividade térmica de misturas: Lindsay e Bromley (1950) [58], baseando-se na teoria cinética e no modelo de Sutherland (precisão de 1,9%), Mason e Saxena, (1958) [59] baseando-se na teoria cinética (desvio médio em relação a dados experimentais de 1,2% e máximo de 5,5%) e Muckenfuss e Curtiss, (1958) [60], (maior desvio 1,8%), para misturas multi-componentes e supondo que os coeficientes de termodifusão são pequenos, e Brokaw (1960) [61].

Kestin *et al.* (1984) [54] escreveram um artigo de referência com propriedades de diversos gases e misturas, citando mais de 2000 artigos. São provavelmente os melhores dados disponíveis para mistura no momento. Eles obtiveram fórmulas semi empíricas para condutividade térmica e outros coeficientes de transporte.

Os artigos de Bich (2007) *et al.* [62] e Vogel (2010) *et al.* [63], que utilizaram Mecânica Quântica, teoria cinética, e a aproximação semi-clássica

JWKB, apresentam os dados mais exatos disponíveis para hélio e argônio, respectivamente, uma vez que utilizaram potenciais AI.

Sharipov e Bertoldo (2009) [64] apresentaram dados para os gases nobres (He, Ne, Ar, Kr e Xe) utilizando o método de velocidade discreta para resolver a equação de Boltzmann linearizada com potencial de LJ. Os valores deste trabalho para He e Ar estão reproduzidos na tabela 3.1. A condutividade térmica dimensional se relaciona com a adimensional por  $\kappa = \tilde{\kappa} k_B v_m / d^2$ , onde  $v_m = (2k_B T / m)^{1/2}$ .

Tipton (2009) *et al.* [65] apresentaram a condutividade térmica para mistura binária utilizando o método de expansão em termos de polinômios de Sonine, com precisão numérica muito alta (21 dígitos significativos), porém para modelo de esferas rígidas.

Song *et al.* (2009) [66] apresentaram propriedades de transporte para gases nobres e suas misturas, a partir do número de Prandtl AI. No entanto, o cálculo que eles fizeram não é exato, uma vez que estes utilizam apenas uma aproximação para a condutividade térmica e viscosidade, obtidas através de expansão de primeira ordem. No trabalho citado acima, [65], pode-se ver que a diferença entre a melhor aproximação e a de primeira ordem chega a mais de 3%. Na tabela 3.1 os dados foram ajustados pela raiz quadrada para 300 K, isto pois nem todos os autores utilizam esse valor e a viscosidade para HS é proporcional à raiz quadrada da temperatura, e interpolados para concentrações 0,25 e 0,75.

### 3.1.1 Valores de referência

Para efeitos de comparação, iremos considerar os valores dados na quinta coluna da tabela 3.1 para gás único, e da segunda coluna para mistura. Esses valores são repetidos na tabela 3.2. Para os gases puros, o erro numérico reportado pelos autores é inferior a 0,02%. Para He-Ar o erro reportado é 0,7%.

Tabela 3.1: Resumo da literatura para condutividades térmicas  $\kappa$  para mistura He-Ar a 300 K.  $C_0$  é a concentração de equilíbrio da mistura.

$C_0$	$\kappa$ (mW/m·K)				
	a	b	c (HS)	e f	d
0,0	17,83	17,789	17,466	17,709 e	17,79
0,25	32,71	31,797	28,767	—	—
0,5	54,36	52,976	46,684	—	—
0,75	89,28	88,284	79,815	—	—
1,0	156,66	157,71	153,62	156,66 f	156,56

a-Kestin *et al.*, 1984, [54].

b-Song *et al.*, 2010, [66].

c-Tipton *et al.*, 2009, [65].

d-Sharipov e Bertoldo, 2009, [64].

e-Vogel *et al.*, 2010, [63].

f-Bich *et al.*, 2007, [62].

## 3.2 Viscosidade

Curtiss e Hirschfelder, (1949), [67] e Wilke (1950) [68], apresentaram fórmulas analíticas para viscosidade de misturas.

O artigo de revisão de Kestin (1984) [54] contém os melhores dados disponíveis para mistura antes de nosso trabalho. Eles obtiveram fórmulas semi-empíricas com um rigor teórico sem precedentes.

Bzowski *et al.*, (1990) [69], apresentaram dados de Propriedades de Transporte, incluindo viscosidade, e de Equilíbrio de misturas gasosas a baixa densidade, para onze gases poliatômicos e cinco gases nobres.

Tipton *et al.* (2009) [70] apresentaram a viscosidade para mistura binária utilizando o método de Chapman–Enskog com precisão numérica muito grande (21 dígitos significativos), porém para modelo de esferas rígidas.

Sharipov e Bertoldo (2009) [64] apresentaram dados para gases nobres únicos utilizando o método de velocidade discreta. Os dados do artigo são reproduzidos na tabela 3.3, onde a viscosidade dimensional se relaciona com

Tabela 3.2: Valores de referência para condutividade térmica  $\kappa$  para mistura He-Ar, a 300 K.

$C_0$	$\kappa$ (mW/mK)	precisão
0,0	17,709	0,02% [63]
0,25	32,71	0,7% [54]
0,5	54,36	0,7% [54]
0,75	89,28	0,7% [54]
1,0	156,66	0,02% [62]

a adimensional do artigo por  $\mu = \tilde{\mu}mv_m/d^2$ .

Os artigos de Bich *et al.* (2007) [62] e Vogel (2010) *et al.* [63] apresentam provavelmente os melhores dados disponíveis para gás único, uma vez que utilizaram potenciais AI.

Berg e Moldover (2012) [71] apresentaram viscosidades recomendadas, que no momento são as mais exatas, medidas em laboratório, para 11 gases diluídos à temperatura de 25°C, em particular os gases nobres He, Ne, Ar, Kr e Xe, com erro estimado de 0,03%.

Huang *et al.* (2012) [72] apresentaram a viscosidade de Hélio 3 desde 3 mK até 500 K.

Tabela 3.3: Viscosidades  $\mu$  à 300 K, usando o método de velocidades discretas da Ref. [64].

gás	$\mu$ ( $\times 10^{-6}$ Pa.s).
Hélio	19,982
Argônio	22,674

Dodulad *et al.*, [73], (2014) obtiveram a viscosidade para a mistura He-Ar, para diferentes concentrações, através da resolução do problema de escoamento de Couette, resolvendo numericamente a equação de Boltzmann com potenciais AI e de LJ.

### 3.2.1 Valores de referência

A tabela 3.4 apresenta os melhores valores, com as respectivas referências, que iremos usar para comparação. Para o He puro o erro numérico relativo reportado é menor que 0,02%. Para He-Ar o erro relativo reportado é de 0,4%.

Tabela 3.4: Valores de referência para a viscosidade  $\mu$  de uma mistura He-Ar, a 300 K.

$C_0$	$\mu$ ( $\times 10^{-6}$ Pa.s)	precisão
0,0	22,669 [63]	—
0,25	23,33 [54]	0,4%
0,5	23,67 [54]	0,4%
0,75	23,30 [54]	0,4%
1,0	19,910 [62]	0,02%

## 3.3 Transferência de calor

### 3.3.1 Descrição do problema

Considere uma mistura gasosa binária confinada entre duas placas paralelas fixas em  $x = \pm H/2$  e com diferentes temperaturas  $T_0 \pm \Delta T/2$ , respectivamente, vide figura 3.3.1. Assim,  $H$  é a distância entre as placas e  $\Delta T$  é a diferença de temperatura. Vamos calcular o fluxo de calor  $q'_x$ , o perfil de temperatura  $T(x)$  e a distribuição de fração molar  $C(x)$  entre as placas.

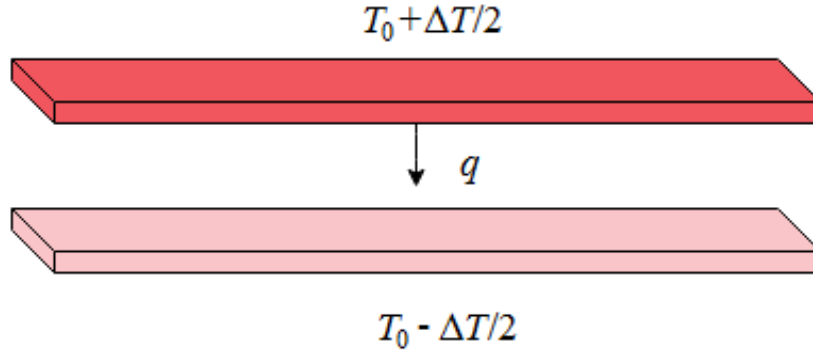


Figura 3.1: Esquema de transferência de calor.

Além da razão  $\Delta T/T_0$ , a solução do problema é determinada por mais dois parâmetros. Um deles é a fração molar de equilíbrio definida em 2.4. Por causa do fenômeno de termodifusão, a fração molar varia entre as placas de modo que iremos distinguir o valor de equilíbrio  $C_0$ , ou seja, o seu valor em  $\Delta T = 0$ , e a fração molar local  $C(x)$  que é uma função da coordenada  $x$  quando  $\Delta T \neq 0$ . O outro parâmetro que determina a solução é o parâmetro de rarefação definido em 2.6.

A solução do problema em questão também é determinada pelo modelo de interação gás-superfície, mas no presente trabalho não estamos interessados na influência dessa interação sobre a transferência de calor. Portanto, a reflexão difusa de partículas gasosas de ambas as espécies nas placas é assumida. A reflexão difusa onde a partícula que colide com a superfície sai em uma direção qualquer e com uma velocidade dada pela distribuição de Maxwell para a temperatura da superfície, independentemente da velocidade incidente.

Os resultados são dados em termos de fluxo de calor  $q$  adimensional definido por

$$q := -\frac{q'_x T_0}{p_0 v_0 \Delta T}, \quad (3.1)$$

que é sempre positivo. Os resultados adimensionais, ou seja,  $q$  em função

de  $\delta$ , não necessitam da especificação da distância dimensional  $H$  e pressão  $p_0$ , mas são válidos para ampla gama destas quantidades. Uma vez que o fluxo de calor reduzido  $q$  depende fracamente da diferença de temperatura relativa  $\Delta T/T_0$ , o conhecimento dessa quantidade nos permite utilizar os dados obtidos para um valor específico de  $\Delta T/T_0$  em uma grande faixa desta relação.

### 3.3.2 Caso de teoria linear para gás único

Nesta seção falaremos de artigos de teoria linear, isto é, quando  $\Delta T$  é pequeno, para gás único. Bassani *et al.* (1967) [74] estudaram o problema de transferência de calor supondo acomodação completa do gás às condições das superfícies. Depois, Bassani *et al.* (1968) [75] estudaram a influência do coeficiente de acomodação. Neste segundo trabalho consideraram o problema tanto entre placas paralelas como em cilindros concêntricos, para parâmetros de rarefação de 0 a 10. Siewert (1999) [76] apresentou uma solução de ordenadas discretas para transferência de calor em um canal plano. Eles obtiveram resultados para coeficientes de acomodação arbitrários e desiguais. Sharipov *et al.* (2007) [77] estudaram a transferência de calor para gás único e numa mistura, para o caso linear, utilizando o modelo S que foi resolvido pelo método de velocidade discreta. Os resultados obtidos foram o fluxo de calor e a distribuição de temperatura.

### 3.3.3 Caso da teoria linear para mistura

Aqui são reportados artigos também do caso de teoria linear, porém para uma mistura. Valougeorgis e Thomas (1985) [78] utilizaram a equação cinética para resolver o problema de transferência de calor entre placas paralelas. Garcia e Siewert (2004) [79] aplicaram o modelo de McCormack para misturas no caso de transferência de calor em canal plano utilizando uma versão analítica do método de velocidades discretas. E como dissemos no item anterior, Sharipov *et al.* (2007) [77] estudaram a transferência de calor



tanto para um gás único como para uma mistura, no caso linear.

### 3.3.4 Caso da teoria não linear para gás único

Artigos de teoria não linear para gás único são revistos nesta seção. Aris-tov *et al.* (1990) [80] estudaram o problema de transferência de calor por dois métodos diferentes: um deles através do método de diferença finita da solução direta da equação de Boltzmann, e o outro método de simulação estatística direta. Graur e Polikarpov (2009) [81] fazem uma comparação de diversos modelos aplicados a transferência de calor. Eles concluíram que o modelo elipsoidal dá resultados mais próximos aos dos resultados da equação de Boltzmann não linear e resultados DSMC. Concluíram também que a discrepância entre os resultados experimentais e os valores numéricos pode ser explicada pelo kernel “imperfeito” difuso-especular de Maxwell. Reflexão difuso-especular é quando parte das partículas sofre reflexão difusa, e outra parte sofre reflexão especular. Scherer *et al.* (2009) [82] desenvolveram um método analítico denominado ADO, versão analítica do método de velocidades discretas, e aplicaram a problemas de transferência de calor.

### 3.3.5 Caso de teoria não linear para mistura

Por fim, nesta seção, falaremos de artigos do último caso possível, isto é, da teoria não linear para mistura. É um problema que foi pouco estudado e por isso há poucos artigos. Kosuge *et al.* (2001) [83] utilizaram o método de diferenças finitas da equação de Boltzmann para a transferência de calor por uma mistura binária hipotética. Não trataram de gás único. Raines (2008) [84] estuda a transferência de calor numa mistura gasosa entre duas placas paralelas. O método utilizado é derivado da equação de Boltzmann, e os gases são hipotéticos, ou seja, com massas e diâmetros assumidos sem relação com gases reais.

### 3.3.6 Valores de referência

Para efeitos de comparação, para gás único e mistura, iremos considerar os valores dados na tabela 3.5.

Tabela 3.5: Fluxo de calor adimensional  $q$  vs. parâmetro de rarefação  $\delta$  e concentração  $C_0$ , para potencial realístico (PR) e mistura He-Ar de [77]. O erro numérico reportado é menor que 0,1%.

$\delta$	$q$				
	$C_0 = 0$	0,25	0,5	0,75	1
0,01	0,56076	0,76048	0,86550	0,83812	0,56076
0,1	0,53511	0,72740	0,82890	0,80304	0,53511
1	0,40014	0,54599	0,62520	0,60835	0,40014
10	0,13483	0,18359	0,21230	0,20954	0,13483
20	0,07841	0,10685	0,12390	0,12269	0,07841
40	0,04269	0,05820	0,06762	0,06709	0,04269

## 3.4 Escoamento plano de Couette

### 3.4.1 Descrição do escoamento de Couette

Considere uma mistura gasosa confinada entre duas placas infinitas fixas em  $x = \pm H/2$  mas que se movem na direção  $y$  com velocidades  $\pm U/2$ , respectivamente, vide figura 3.2. Assim,  $H$  é a distância entre as placas e  $U$  é a sua velocidade relativa. Estamos interessados no tensor de cisalhamento  $P_{xy}$ , e nos perfis de velocidade  $u_y(x)$ , temperatura  $T(x)$  e fração molar  $C(x)$ .

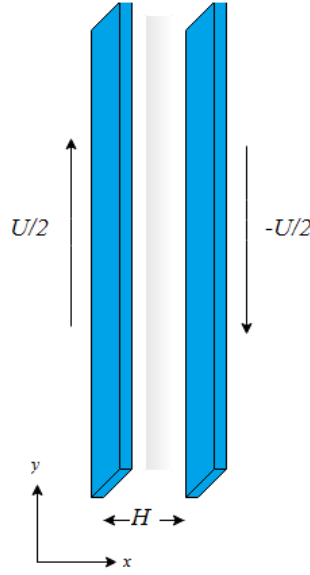


Figura 3.2: Esquema de escoamento Couette.

O problema é determinado por três parâmetros principais. O primeiro deles é a composição química da mistura, caracterizada por sua fração molar  $C$ . O movimento das placas faz com que haja uma variação da fração molar entre elas, o que pode ser importante para uma velocidade elevada da parede  $U$ . Assim, deve-se distinguir a fração molar de equilíbrio  $C_0$ , ou seja, o seu valor em  $U = 0$ , da fração molar local  $C(x)$ , que em geral não é uniforme. O segundo parâmetro é a razão entre a velocidade da parede  $U$  e a velocidade molecular característica de mistura  $v_0$ , que determina se o problema será linear ou não, e o terceiro parâmetro é a rarefação  $\delta$ .

Da mesma forma que para transferência de calor, no caso geral, a solução do problema de Couette é determinada também pela lei de interação gás-superfície. Uma vez que nosso objetivo é estudar a influência do potencial intermolecular, a acomodação completa, ou seja a reflexão difusa de partículas gasosas na superfície da placa, é assumida.

Os resultados são dados em termos do tensor de cisalhamento adimensional definido como

$$\Pi := -\frac{P_{xy}v_0}{Up_0}, \quad (3.2)$$

que é sempre positivo. Tal apresentação de resultado em forma adimensional, ou seja,  $\Pi$  em função de  $\delta$ , dispensa a necessidade de especificar a distância  $H$  e pressão  $p_0$ , ou seja, os resultados são válidos para uma ampla gama de valores de  $H$  e  $p_0$ . Uma vez que o tensor de cisalhamento reduzido  $\Pi$  depende fracamente da razão  $U/v_0$ , o conhecimento dessa quantidade nos permite usar os dados de  $\Pi$  em uma ampla gama desta razão.

### 3.4.2 Caso da teoria linear para gás único

Nesta seção falamos de artigos de teoria linear para gás único. Cercignani e Pagani (1965) [85] aplicaram um método de princípio variacional geral para três problemas a saber, Kramers, Couette e Poiseuille, obtendo resultados de grande precisão com facilidade. Bhatnagar e Srivastava (1969) [86] estudaram a transferência de calor no escoamento plano de Couette usando o modelo de Bhatnagar-Gross-Krook linearizado. Ueno (1995) [87], utilizando a equação de Boltzmann linear, fez uma aproximação probabilística para a dinâmica dos gases rarefeitos, e em particular ao escoamento linearizado de Couette. Lemus e Velasco, (1999) [88] estudaram a condição de contorno de deslizamento no escoamento de Couette utilizando a equação de Boltzmann. Marques et al. (2000) [89] estudaram o escoamento plano de Couette com condições de salto e de deslizamento. Eles utilizaram as equações de campo dos meios contínuos e compararam os resultados com a DSMC. Marques e Kremer (2001) [90] mostraram o escoamento de Couette como sendo de uma teoria de 13-campos com condições de deslizamento e salto. Siewert (2002) [91] estudou o escoamento de Poiseuille, de Couette, e fluência térmica, baseada no modelo CES da equação de Boltzmann linearizada. Taheri (2009) *et al.* [92], obtiveram soluções analíticas para as equações de 13-momento para micro escoamentos de Couette e Poiseuille.

### 3.4.3 Caso da teoria linear para mistura

Nesta seção falaremos de alguns artigos de teoria linear para mistura.

Onishi [93], Valougeorgis [94] e Siewert [95] apresentaram resultados numéricos usando o modelo de Hamel [96] para a equação de Boltzmann. Entretanto, este modelo não é completo. Sharipov *et al.* (2004) [97] estudaram o escoamento plano de Couette para misturas binárias gasosas para o intervalo inteiro de rarefação. O método utilizado foi a equação modelo de McCormack. Como se pode notar, trata-se de um problema pouco estudado e com poucos artigos.

#### **3.4.4 Caso da teoria não linear para gás único**

Agora, sobre artigos da teoria não linear para gás único, Agrawal *et al.* (1987) [98] estudaram a transferência de calor num escoamento de Couette instável de um gás condutor sujeito a um campo magnético. Cercignani e Cortese (1994) [99] compararam o método DSMC com a equação de Boltzmann, para um gás único, concluindo que a DSMC produz resultados consistentes. Chernyak e Polikarpov (2010) [100] estudaram efeitos não lineares no escoamento de Couette, usando o chamado modelo S. Abramov *et al.* (2013) [101] estudaram o escoamento de Couette com transferência de calor. Eles resolveram a equação de Boltzmann diretamente. Larina e Rykov (2014) [102] fizeram um estudo do escoamento de Couette, para gás único, utilizando um modelo cinético não linear e fora do equilíbrio, da equação de Boltzmann.

#### **3.4.5 Caso da teoria não linear para mistura**

Por fim, encontramos um único artigo de teoria não linear para mistura, de Koura (1970) [103] que estudou o escoamento transiente de Couette de misturas binárias de gases rarefeitos hipotéticos. Ele estudou caso não linear e utilizou a DSMC. Então, a teoria não linear para misturas é um problema pouco estudado e com poucos trabalhos.

#### **3.4.6 Valores de referência**

Para efeitos de comparação, para gás único e mistura, iremos considerar

os valores dados na tabela 3.6.

Tabela 3.6: Tensão de cisalhamento adimensional  $\Pi$  vs. parâmetro de rarefação  $\delta$  e concentração  $C_0$ , para potencial realístico e mistura He-Ar segundo a Ref. [97]. O erro numérico relativo reportado é menor que 0,1%.

$\delta$	$\Pi$				
	$C_0 = 0$	0,25	0,5	0,75	1
0,01	0,55930	0,5270	0,4969	0,4787	0,5593
0,1	0,5223	0,4938	0,4671	0,4510	0,5223
1	0,3388	0,3257	0,3133	0,3058	0,3388
10	0,08308	0,08218	0,08129	0,08075	0,08308
20	0,04538	0,04511	0,04483	0,04467	0,04538
40	0,02379	0,02371	0,02364	0,02359	0,02379

## 3.5 Escoamento através de orifício

O escoamento através de orifício é um tipo de escoamento muito próximo do escoamento através de fenda, [104–107], onde a diferença reside apenas na geometria, ou do escoamento através de um tubo [108–113] sendo a diferença nesse caso o mero comprimento do tubo. Um tubo de comprimento desprezível se reduz a um orifício. Assim, nossa revisão bibliográfica desse assunto, não tem a pretensão de ser completa, visto que muitos resultados desses outros escoamentos podem incluir o orifício como caso particular.

### 3.5.1 Descrição do problema

Considere um orifício em uma partição infinitamente fina, que separa dois recipientes semi-infinitos, vide figura 3.3. Um deles contém um gás a uma pressão  $p_0$ , enquanto o outro recipiente é mantido a uma pressão menor  $p_1 < p_0$ . As temperaturas do gás em ambos os recipientes são iguais a  $T_0$ . Vamos calcular a taxa de fluxo de massa  $\dot{M}$  através do orifício e o campo do escoamento nos recipientes.

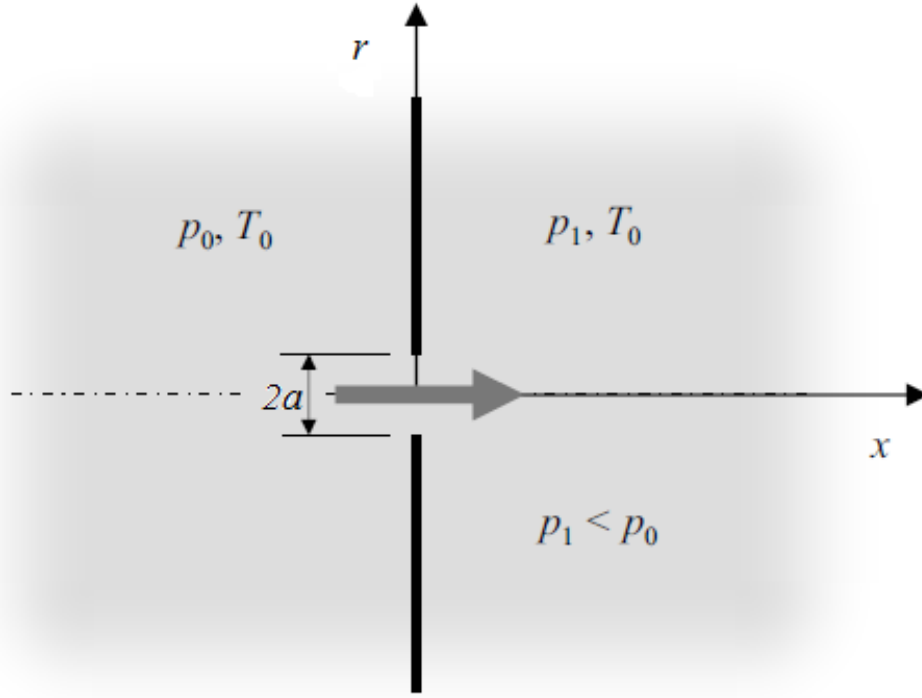


Figura 3.3: Esquema de orifício.

A solução do problema é determinada por dois parâmetros principais: a relação de pressão  $p_1/p_0$  e o parâmetro de rarefação do gás  $\delta$  agora definido como

$$\delta = \frac{ap_0}{\mu_0 v_0}, \quad (3.3)$$

onde  $a$  é o raio do orifício.

Os resultados relativos à taxa de fluxo serão dados em termos da taxa de fluxo reduzida definida como

$$W := \frac{\dot{M}}{\dot{M}_0}, \quad \dot{M}_0 = \frac{\sqrt{\pi} a^2 p_0}{v_0}, \quad (3.4)$$

onde  $\dot{M}_0$  é a taxa de fluxo de massa no regime de molécula livre ( $\delta \rightarrow 0$ ) e no limite de  $p_1/p_0 \rightarrow 0$ . Assim, para uma razão de pressão arbitrária, a vazão adimensional  $W$  fica

$$W = 1 - \frac{p_1}{p_0}, \quad \text{em } \delta \rightarrow 0. \quad (3.5)$$

### 3.5.2 Revisão da literatura de orifício

O fluxo de gás rarefeito através de um orifício numa partição fina é algo de grande interesse prático. Este tipo de fluxo é feito em equipamento de vácuo, ver por exemplo, Dushman [114], Roth [115], microfluídos, ver, por exemplo Aktas *et al.* [116], microscopia eletrônica, Danilatos [117], [118], projeto de naves espaciais, Jamison *et al.* [119], metrologia do fluxo de gás, Szwemin *et al.* [120], Jitschin *et al.* [121], [122], e em muitas outras aplicações. Como foi observado nos artigos [123], [124] e [125], até a publicação de [125] (2004), não haviam resultados confiáveis sobre o fluxo através de orifício disponíveis na literatura para vasta gama de rarefação do gás e queda de pressão através do orifício.

Vários trabalhos, ver por exemplo Liepmann [126], Narasimha [127], Willis [128], Rotenberg e Weitzner [129], propuseram expressões analíticas para a taxa de fluxo de massa perto do regime de molécula livre para saída no vácuo. Alguns dados numéricos para saída no vácuo do regime de transição são relatados por Shakhov [130] e Sharipov [124]. No regime hidrodinâmico o problema foi resolvido com base nas equações de Euler, por Alder [131], que são válidas para altos valores do número de Reynolds onde a viscosidade se torna pouco importante e as equações de Navier-Stokes se reduzem às de Euler.

No caso de baixo número de Reynolds, foi resolvido analiticamente, ver Roscoe [132], Hasimoto [133], através da equação de Stokes (uma versão linearizada das equações de Navier-Stokes).

Resultados experimentais para o fluxo através de orifício no regime hidrodinâmico foram relatados por Perry [134] para uma grande diferença de pressão e por Linden e Othmer [135] para pequena diferença de pressão. Alguns resultados experimentais no caso de saída em vácuo são apresentados por Liepmann [126]. Sreekanth [136] apresentou dados experimentais para o regime de transição para vários valores da diferença de pressão. Borisov *et al.* [137] e Porodnov *et al.* [138] forneceram resultados experimentais para



pequena diferença de pressão e para uma ampla gama de rarefação do gás. Jitschin [122] apresentou dados experimentais para saída em vácuo através de um orifício cobrindo praticamente toda a gama de rarefação do gás. Fujimoto e Usami [139] apresentaram resultados experimentais para a taxa de fluxo de massa através de tubos curtos, sendo que o tubo mais curto aproxima de um orifício.

A maioria dos resultados para o escoamento de gás rarefeito através de orifício são baseados no método DSMC, e quase a totalidade é para gás único. Jitschin *et al.* (1995), [121] fizeram medidas de escoamento através de orifícios e tubos de Venturi para He, Ar, Kr e outros gases. Danilatos (2000) [117] estudou o escoamento por orifício do gás argônio usando DSMC, em todos os regimes de rarefação. Sharipov (2001) no artigo [140] calculou o escoamento através de orifício no vácuo usando DSMC. Alexeenko (2002) *et al.* [141] estudou o escoamento por orifício no regime de transição. Resultados numéricos (DSMC) e experimentais são fornecidos para os gases nitrogênio, argônio e hélio, à temperatura ambiente.

No artigo [142] Sharipov (2002) calculou o escoamento através de orifício para diversas razões de pressão, usando a DSMC. Ainda Sharipov, em [125], (2004) calculou o escoamento através de orifício para diversos valores do número de Knudsen, usando DSMC. Gimelshein *et al.* (2004), [143], fizeram um estudo experimental e de modelagem numérica de escoamento de gás rarefeito através de orifício e pequenos tubos. Eles utilizaram a DSMC e as equações de Navier-Stokes.

Varoutis (2008) *et al.* [144] estudaram tubos curtos usando a DSMC, que podem ser reduzidos ao problema de orifício. Sharipov (2012) [145] estudou o fluxo transiente de gás por orifício usando a DSMC. Fedchak e Defibaugh (2012) [146] fizeram medidas precisas (erro reportado de 0,02%) utilizando um fluxímetro de pressão constante. Misdanitis *et al.* (2012), [147] estudaram o escoamento de gás rarefeito dirigido por pressão através de fenda e de orifício. O método utilizado é a equação modelo BGK. Ho e Graur (2014), [148], fizeram um estudo numérico de escoamento de gás não estável através de orifício

utilizando o modelo S. Vargas *et al.* (2014), [149], estudaram o escoamento dependente do tempo de gases únicos (He, Ar, Ne e Kr) rarefeitos e misturas gasosas destes, rarefeitas, por orifício para o vácuo, utilizando a DSMC e também dados experimentais. Pantazis e Rusche (2014) [150], desenvolveram um método para fluxo instável de gás que usa um híbrido de contínuo, baseado nas equações compressíveis de Navier-Stokes, e de partículas, baseado na DSMC. Eles estudaram o caso particular de orifício.

Podemos ver que, como dissemos, quase todos os trabalhos citados consideraram apenas gás único.

Alguns dados da literatura são resumidos na tabela 3.7 extraída da Ref. [151].

Tabela 3.7: Fluxo de massa reduzido  $W$  através de um orifício.  $\Delta W = W_{max} - W_{min}$ .

$p_1/p_0$	$\delta$	$W$					$\Delta W/\bar{W}(\%)$
		a	b	c	d	e	
0	0,1	1,014	1,02	1,01	1,01	1,01	1,3
	1	1,119	1,15	1,12	1,12	1,13	2,9
	10	1,448	1,47	1,45	1,49	1,43	3,2
	100	1,540	1,51	—	1,59	1,51	5,1
0,5	0,1	0,509	0,515	—	—	—	1,2
	1	0,613	0,635	—	—	—	3,5
	10	1,188	1,22	—	—	—	2,7
	100	1,344	1,33	—	—	—	0,3

- a) Ref. [125], DSMC, erro computacional de 1%.
- b) Ref. [147], DVM aplicada à BGK, precisão de dois dígitos significativos.
- c) Ref. [139], experimentos para Ar, erro de 2%.
- d) Ref. [122], experimentos para Kr, erro de 2%.
- e) Ref. [152], experimentos para H<sub>2</sub>, erro de 2%.

Tabela 3.8: Taxa de fluxo reduzida  $W$  vs. parâmetro de rarefação  $\delta$  e razão de pressão  $p_1/p_0$  para esferas rígidas (HS) e esferas rígidas variáveis (VHS), de [125]. O erro numérico reportado é menor que 1%.

$p_1/p_0$	$\delta$	$W$	
		HS	VHS
0	0,1	1,014	1,014
	1	1,129	1,115
	10	1,462	1,446
	100	1,534	1,531
0,1	0,1	0,910	0,910
	1	1,032	1,020
	10	1,435	1,415
	100	1,524	1,521
0,5	0,1	0,509	0,507
	1	0,613	0,603
	10	1,188	1,160
	100	1,344	1,344
0,9	0,1	0,1025	0,1022
	1	0,1297	0,1271
	10	0,4015	0,3701
	100	0,6741	0,6703

## Capítulo 4

# O Método da Simulação Direta de Monte Carlo

### 4.1 Métodos de Monte Carlo e a DSMC

Os métodos de Monte Carlo providenciam soluções por meios de amostras estatísticas realizadas pelo computador a partir de geradores de números aleatórios. Na verdade, qualquer método que utiliza números aleatórios é um método de Monte Carlo. Esses métodos foram criados durante a 2<sup>a</sup> guerra mundial, por John von Neumann [153] entre outros, para simular o movimento de nêutrons numa bomba atômica. Uma classe particular de simulações de Monte Carlo são aquelas relacionados aos problemas de Teoria Cinética. Nestes é feito a simulação do movimento de moléculas ou de agrupamento de moléculas chamadas de partículas modelo.

O método DSMC, proposto por Bird [13, 14, 154], é uma técnica baseada na descrição do comportamento macroscópico do fluxo de gases a partir da simulação de partículas (átomos ou moléculas). Bird, entre outros [99, 155, 156], mostrou que o método DSMC fornece resultados consistentes com os resultados numéricos com base na equação de Boltzmann.

A ideia do método é simular o movimento e interações (colisões entre as partículas e as superfícies sólidas) de um grande número de partículas modelo. O conceito de partícula modelo foi introduzido, devido ao fato de que simular

todas as partículas reais em um escoamento é computacionalmente inviável devido ao número muito elevado dessas partículas.

A quantidade real de partículas representadas por uma partícula modelo é dada por

$$F_N = N_r/N_p, \quad (4.1)$$

onde  $F_N$  é a representação de partículas modelo,  $N_r$  é o número de partículas reais e  $N_p$  o número de partículas modelo.

No método DSMC,  $N_p$  partículas modelo são consideradas em uma determinada região de escoamento, e as coordenadas e velocidades das partículas ( $i = 1, \dots, N$ ) são armazenadas na memória do computador. Uma das características desta simulação é o desacoplamento entre movimento e a colisão de partículas entre si, que são realizados em passos discretos de um intervalo de tempo  $\Delta t$ , ou seja, executa-se o movimento livre das partículas e, em seguida, as colisões entre elas. De acordo com Bird, este procedimento é válido desde que o valor de  $\Delta t$  utilizado na simulação seja suficientemente menor do que o tempo médio de colisão entre as partículas.

## 4.2 Passos da DSMC

O algoritmo do método DSMC chamado “Não contador de tempo”, proposto por Bird é mostrado na Figura 4.1. Cada passo é descrito na seção seguinte.

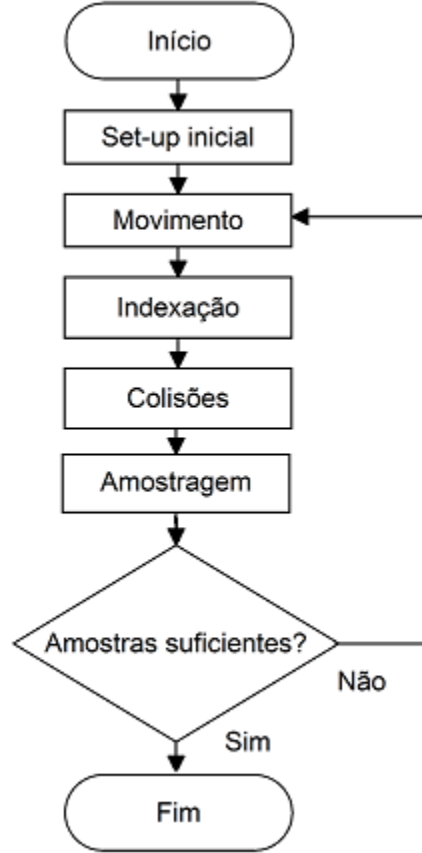


Figura 4.1: Esquema da DSMC

### 4.2.1 Set-up inicial

Nesta etapa as partículas modelo são distribuídas de forma uniforme, e obedecendo a distribuição de Maxwell para a temperatura de equilíbrio. Porém, qualquer que seja o set-up inicial, o resultado da simulação será mesmo.

### 4.2.2 Movimento Livre

Após a definição dos parâmetros iniciais da simulação, como o número de partículas modelo, os estados iniciais  $(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  de cada partícula e a malha de células na primeira fase, o algoritmo iterativo faz todas as partículas com velocidade  $\mathbf{v}_i$  se moverem durante um intervalo de tempo  $\Delta t$ . As “novas coordenadas”, denotadas por  $\mathbf{r}_{i,novo}$  são calculadas a partir das “coordenadas

antigas”  $\mathbf{r}_{i,velho}$  por

$$\mathbf{r}_{i,novo} = \mathbf{r}_{i,velho} + \mathbf{v}_i \Delta t. \quad (4.2)$$

## Interação Gás Superfície

Durante o movimento das partículas elas poderão eventualmente colidir com uma superfície sólida a uma temperatura  $T_s$ . Nós iremos considerar apenas as interações do tipo difusa. A velocidade após a colisão com a superfície pode ser dividida em duas componentes, uma normal  $v_n$  e uma tangencial  $\vec{v}_t$ .

A velocidade normal à superfície segundo Bird é dada por

$$v_n = v_s \sqrt{-\ln R_f}, \quad (4.3)$$

e a componente tangencial também pode ser dividida em duas componentes perpendiculares, dadas por

$$v_{t1} = v_t \cos \theta, \quad v_{t2} = v_t \sin \theta, \quad (4.4)$$

onde

$$v_t = v_s \sqrt{-\ln R_f}, \quad \theta = 2\pi R_f \quad (4.5)$$

e

$$v_s = \sqrt{2k_B T_s / m}. \quad (4.6)$$

onde  $R_f$  é um número aleatório entre 0 e 1, e que é diferente cada vez que é chamado.

### 4.2.3 Indexação de partículas

Após o movimento das partículas é necessário saber para qual célula a partícula se moveu. Isto é fundamental para os próximos passos (colisões intermoleculares e cálculo de quantidades macroscópicas), porque apenas as partículas que estejam numa mesma célula podem colidir, e o cálculo de quantidades macroscópicas apenas pode ser feito sobre as partículas que estão numa dada célula. A indexação é, portanto, um procedimento para saber quais partículas estão em uma determinada célula, e para dar um nome local

para elas, a fim de selecioná-las para as colisões. Além das células, existem também subcélulas, que são divisões dentro de uma mesma célula, cujo objetivo é obter maior precisão numérica numa dada região. No caso da indexação, é necessário saber para quais subcélulas também a partícula se moveu.

#### 4.2.4 Colisões

Nesta etapa, as colisões intermoleculares são simuladas. Este passo merece uma descrição mais detalhada, uma vez que a seleção de parceiros para a colisão não é trivial.

Quando o método DSMC foi proposto pela primeira vez, as colisões não eram totalmente desacopladas do movimento das partículas, e levavam um certo tempo para ocorrer. Ao fazer as colisões era preciso ir contando o tempo para saber quanto tempo ainda estava disponível para as colisões ocorrerem. Este método era chamado de contador de tempo e foi muito criticado uma vez que não havia caos verdadeiro. A probabilidade de uma determinada colisão acontecer dependia do histórico de colisões anteriores, e não apenas das velocidades relativas das partículas. Diante das críticas, Bird propôs um novo método, onde as colisões são simuladas de forma totalmente desacoplada do movimento, e sem contagem de tempo algum. As colisões ocorrem instantaneamente. Esse novo método foi chamado de “sem contador de tempo” e constitui um processo estocástico legítimo, como num processo de Markov, onde o estado futuro só depende do presente, e não do passado.

Agora vamos descrever este método. Seja uma partícula teste que se move com velocidade  $\mathbf{v}_t$  em meio a partículas que se movem com velocidade entre  $\mathbf{v}$  e  $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$ . A velocidade relativa entre a partícula teste e as outras é  $\mathbf{v}_r = \mathbf{v}_{teste} - \mathbf{v}$ . Num intervalo de tempo  $\Delta t$  a partícula teste irá colidir com qualquer partícula dentro do cilindro de volume  $\sigma_T v_r \Delta t$ , vide figura 4.2 (onde  $\sigma_T$  é a seção transversal total de choque, que para esferas de diâmetro  $d$  vale  $\sigma_T = \pi d^2$ ). A quantidade de colisões entre a partícula teste e as de velocidade  $\mathbf{v}$  será  $\Delta n \sigma_T v_r \Delta t$ , onde  $\Delta n$  é a densidade numérica dessas



partículas. O número de colisões por unidade de tempo será  $\Delta n \sigma_T v_r$ .

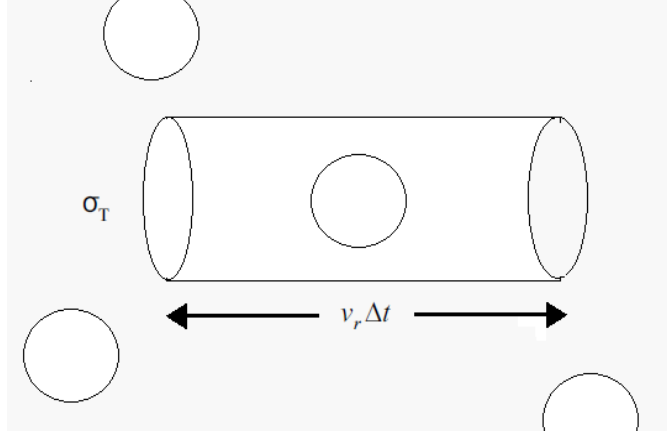


Figura 4.2: Cilindro imaginário.

Para todas as velocidade possíveis somamos sobre todas as velocidades. A taxa média de colisão é, portanto,

$$\nu = \sum (\Delta n \sigma_T v_r) = n \sum [(\Delta n/n) \sigma_T v_r] = n \overline{\sigma_T v_r}. \quad (4.7)$$

O número total de colisões reais, por unidade de tempo e de volume, é

$$N_{colR(V, \Delta t)} = \frac{1}{2} n \nu = \frac{1}{2} n^2 \overline{\sigma_T v_r}, \quad (4.8)$$

para partículas de mesma espécie, onde o 1/2 é porque contamos duas vezes a mesma partícula, ou

$$N_{colR(V, \Delta t)} = n_i \nu = n_i n_j \overline{\sigma_{i,j} v_r}, \quad (4.9)$$

para partículas de espécies diferentes, onde  $i$  e  $j = 1, 2$  representam as espécies.

Num intervalo de tempo  $\Delta t$  e num volume  $V_c$  o número de colisões é portanto

$$N_{colR} = \frac{1}{2} n^2 \overline{\sigma_T v_r} \Delta t V_c, \quad (4.10)$$

para mesma espécie, ou

$$N_{colR} = n_i n_j \overline{\sigma_{i,j} v_r} \Delta t V_c, \quad (4.11)$$

para espécies diferentes.

Lembrando que  $n = N_r/V$ , onde  $N_r$  é o número de partículas reais, e que  $N_r = F_N N_P$ , onde  $F_N$  é a representação de partículas modelos, e  $N_P$ , o número de partículas modelo, temos

$$N_{colR} = \frac{1}{2V_c} F_N^2 N_P^2 \overline{\sigma_T v_r} \Delta t, \quad (4.12)$$

para colisões de mesma espécie, ou

$$N_{colR} = F_N^2 N_{P,i} N_{P,j} \overline{\sigma_{i,j} v_r} \Delta t / V_c, \quad (4.13)$$

para colisões de espécies diferentes, onde assumimos  $F_N$  como sendo o mesmo para ambas as espécies.

O número de colisões por partícula modelo é o número de colisões reais dividido pela representatividade, ou seja

$$N_{col} = N_{colR} / F_N, \quad (4.14)$$

de modo que temos

$$N_{col} = \frac{1}{2V} F_N N_P^2 \overline{\sigma_T v_r} \Delta t, \quad (4.15)$$

para colisões de mesma espécie, ou

$$N_{col} = F_N N_{P,i} N_{P,j} \overline{\sigma_{i,j} v_r} \Delta t / V_c, \quad (4.16)$$

para colisões de espécies diferentes.

Finalmente, é muito difícil calcular a média  $\overline{\sigma_T v_r}$ , assim Bird propôs que se utilizasse o valor máximo e depois se descontasse usando um critério de aceitação ou rejeição. Também propôs que se substituísse  $N_P^2$  por  $N_P \bar{N}_P$ , para reduzir a flutuação, se bem que hoje, com o grande número de partículas simulado, isso não é mais necessário. Assim o número de colisões por partícula modelo é dado por

$$N_{col} = \frac{F_N N_P \bar{N}_P (\sigma_T v_r)_{\max} \Delta t}{2V_c}, \quad (4.17)$$

para mesma espécie, e

$$N_{col} = \frac{F_N N_{P,i} \bar{N}_{P,j} (\sigma_{i,j} v_r)_{\max} \Delta t}{V_c}, \quad (4.18)$$

para espécies diferentes.

O critério de aceitação-rejeição, pela frequência de colisões ser proporcional a  $v_r$ , vide Eq. (4.7), é dado por

$$\frac{\sigma_T v_r}{(\sigma_T v_r)_{\max}} > R_f, \quad (4.19)$$

onde  $R_f$  é um número aleatório entre 0 e 1. Quando o teste for verdadeiro, o par é aceito para colisão.

A seção de choque das moléculas depende do modelo molecular assumido. O modelo mais utilizado é o modelo de esferas rígidas (HS), que veremos em detalhes mais a frente, e que simplifica muito os cálculos por ter seção de choque constante, e até mesmo permite não especificar o gás e a sua temperatura. Para o modelo HS, onde  $\sigma_T$  é constante, a aceitação-rejeição se torna

$$\frac{v_r}{(v_r)_{\max}} > R_f, \quad (4.20)$$

Após a seleção do par de partículas e aceitação de sua colisão, as velocidades pós-colisionais das partículas devem ser determinadas. As componentes da nova velocidade relativa são calculadas como:

$$v'_{r1} = v_{r1} \cos \chi + (v_{r2}^2 + v_{r3}^2)^{1/2} \sin \epsilon \sin \chi, \quad (4.21)$$

$$v'_{r2} = v_{r2} \cos \chi + (v_r v_{r3} \cos \epsilon - v_{r1} v_{r2} \sin \epsilon) (v_{r2}^2 + v_{r3}^2)^{-1/2} \sin \chi, \quad (4.22)$$

$$v'_{r3} = v_{r3} \cos \chi - (v_r v_{r2} \cos \epsilon + v_{r1} v_{r3} \sin \epsilon) (v_{r2}^2 + v_{r3}^2)^{-1/2} \sin \chi. \quad (4.23)$$

Para potencial HS os ângulos  $\chi$  e  $\epsilon$  não são pré-determinados, e são calculados como segue:

$$\cos \chi = 2R_n - 1, \epsilon = 2\pi R'_n, \quad (4.24)$$

onde  $R$  e  $R'$  são números aleatórios. Cada vez que um número aleatório é chamado é diferente, e nesse caso as equações (4.21), (4.22), (4.23) assumem uma forma diferente dada por

$$v'_{r1} = v_r \cos \chi, \quad (4.25)$$

$$v'_{r2} = v_r \sin \chi \cos \epsilon, \quad (4.26)$$

$$v'_{r3} = v_r \sin \chi \sin \epsilon. \quad (4.27)$$

Para outros potenciais  $\epsilon$  é calculado da mesma forma, enquanto o ângulo  $\chi$  varia de potencial para potencial. Seu cálculo, ver Eq. 2.32, para um dado potencial constitui um problema de Mecânica Clássica.

Se definirmos a velocidade relativa entre duas partículas 1 e 2 como sendo

$$\mathbf{v}_r = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2, \quad (4.28)$$

as novas velocidades pós-colisionais serão dadas por

$$\mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}_{cm} + \frac{m_2}{M} \mathbf{v}'_r, \quad (4.29)$$

$$\mathbf{v}'_2 = \mathbf{v}_{cm} - \frac{m_1}{M} \mathbf{v}'_r, \quad (4.30)$$

onde  $\mathbf{v}_{cm}$  é a velocidade do centro de massa, (que não muda com a colisão), dada por

$$\mathbf{v}_{cm} = \frac{\mathbf{v}_1 m_1 + \mathbf{v}_2 m_2}{m_1 + m_2}, \quad (4.31)$$

$m_1$  e  $m_2$  são as massas das partículas.

### 4.2.5 Quantidades macroscópicas

As quantidades macroscópicas de nosso interesse são calculadas da seguinte forma. A velocidade hidrodinâmica, ou a velocidade média de partículas na célula, definida por Eq. (2.15) é calculada, para gás único, como

$$\mathbf{u} = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} \mathbf{v}_i. \quad (4.32)$$

A densidade numérica para gás único, definida por Eq. (2.10) é calculada por

$$n = \frac{N_p F_N}{V_c}, \quad (4.33)$$

onde  $N_p$  é número de partículas modelo e  $V_c$  é o volume da célula.

A temperatura termodinâmica  $T$ , ou temperatura absoluta, ou simplesmente temperatura, definida em Eq. (2.20), para gases monoatômicos é dada pela chamada temperatura translacional que é diretamente proporcional à energia cinética média de translação das partículas em relação à velocidade hidrodinâmica, quer dizer, a energia cinética considerando a velocidade peculiar,

$$T = \frac{2}{3k_B N_p} \sum_{i=1}^{N_p} \frac{1}{2} m (\mathbf{v}_i - \mathbf{u})^2. \quad (4.34)$$

O fluxo de calor para um gás monoatômico, definido por Eq. (2.18) é dado por

$$\mathbf{q} = \frac{1}{V_C} \sum_{i=1}^{N_p} \left( \frac{1}{2} m \mathbf{V}_i^2 \right) \mathbf{V}_i, \quad \mathbf{V}_i = \mathbf{v}_i - \mathbf{u}, \quad (4.35)$$

e o tensor pressão, definido por Eq. (2.17), é dado por

$$\mathbf{P} = m \sum_{i=1}^{N_p} \mathbf{V}_i \mathbf{V}_i. \quad (4.36)$$

Para a mistura, as equações (4.32), (4.34), (4.35) e (4.36) ficam simplesmente

$$\mathbf{u} = \frac{1}{m} \sum_j \frac{1}{N_{p,j}} \sum_{i=1}^{N_{p,j}} \mathbf{v}_{i,j} m_j, \quad (4.37)$$

onde  $m = C m_1 + (1 - C) m_2$ ,

$$T = \frac{2}{3k_B} \sum_j N_{p,j} \sum_{i=1}^{N_{p,j}} \frac{1}{2} m_j (\mathbf{v}_{i,j} - \mathbf{u})^2, \quad (4.38)$$

$$\mathbf{q} = \sum_j \frac{1}{V_C} \sum_{i=1}^{N_p} \left( \frac{1}{2} m_j \mathbf{V}_i^2 \right) \mathbf{V}_{i,j}, \quad \mathbf{V}_{i,j} = \mathbf{v}_{i,j} - \mathbf{u}, \quad (4.39)$$

$$\mathbf{P} = \sum_j m_j \sum_{i=1}^{N_{p,j}} \mathbf{V}_{i,j} \mathbf{V}_{i,j}, \quad (4.40)$$

onde o índice  $j$  representa a espécie.

Todas as outras quantidades podem ser calculadas da mesma maneira, com uma espécie adequada de média sobre todas as partículas. Por exemplo, a temperatura para gases monoatômicos é calculada pela energia cinética média de partícula em relação ao referencial de centro de massa do gás, isto é, descontando a velocidade hidrodinâmica, e assim por diante. Para gases diatômicos temos também a energia rotacional.

Nos códigos DSMC, outra forma de fazer os cálculos como o do fluxo de calor, e que é a que utilizamos, é contabilizar a quantidade de movimento ou a energia cinética em relação a um referencial com velocidade hidrodinâmica, das partículas que incidem numa das placas subtraída das que refletem, ou então que cruzam uma superfície imaginária. Para o caso de uma superfície imaginária, faz-se a contabilidade das partículas que cruzam a superfície num sentido e as que cruzam em sentido oposto, e se subtrai as quantidades de movimento, ou as energias, de modo a ter o valor resultante sobre a superfície imaginária, como representado nas equações abaixo

$$P_{xy} = \frac{1}{\Delta t N_p N_{amst}} \left( \sum_{i, v_y > 0} m_i v_{xi} - \sum_{i, v_y < 0} m_i v_{xi} \right), \quad (4.41)$$

$$q = \frac{1}{\Delta t N_p N_{amst}} \left( \sum_{i, v_y > 0} m_i v_i^2 - \sum_{i, v_y < 0} m_i v_i^2 \right), \quad (4.42)$$

num determinado intervalo de tempo  $\Delta t$ , onde  $N_{amst}$  é o número de amostras (cada vez que incrementamos o tempo de um intervalo  $\Delta t$ , temos uma amostra).

## 4.3 Erros

São dois os tipos de erros na DSMC. O erro numérico, que inclui o erro devido a dispersão estatística, que é inversamente proporcional a raiz quadrada do número de amostras, e que se reduz aumentando o número de amostras. Testes feitos com diversos processos iniciados com sementes diferentes mostraram para nós que o número de amostras que utilizamos garantiu uma precisão melhor que 0,5% para todas as grandezas de interesse. Todos os parâmetros arbitrários da simulação, como por exemplo o número de células, intervalo de tempo, etc, e que também influem no erro numérico, são testados para que suas influências fiquem dentro do erro numérico. E o erro físico devido ao potencial. Os artigos [54,55] mostram que para o cálculo da viscosidade, utilizando um método que não é a DSMC, o erro do potencial AI é de 0,02% para Hélio, e também 0,02% para a condutividade térmica para ambos, Hélio e Argônio, o que é inferior ao erro estatístico acima mencionado.

## Capítulo 5

# Métodos propostos nesta tese

Até o presente trabalho, toda a DSMC era baseada em modelos como HS, VHS, VSS, etc. Pensava-se ser impossível fazer a simulação com um potencial qualquer, uma vez que o cálculo do ângulo de deflexão é muito demorado. Neste capítulo veremos como esse problema foi superado e como foi feita a introdução de potenciais arbitrários, e em particular, potenciais AI, neste tipo de simulação.

### 5.1 O método de implementação de potenciais arbitrários na DSMC

Existem vários métodos para simular as colisões intermoleculares. Os principais deles são os esquemas “frequência principal” [157,158] e “não contador de tempo” [13]. Iremos considerar apenas o segundo, que já foi explicado no capítulo 4, embora os dois convirjam.

A fim de utilizar um potencial com uma força de atração, este deve sofrer um “cut off”, isto é, um corte, caso contrário as moléculas iriam interagir até uma distância infinita. Vamos denotar o máximo parâmetro de impacto quando uma colisão acontece como  $b_M$ . Então a seção de choque total é constante e igual a  $\sigma_t = \pi b_M^2$ . O número de pares a serem testados para colisões é dado por (4.17).



A relação das velocidades pós-colisionais com aquelas pré-colisão contém um ângulo de deflexão  $\chi$ , que varia na faixa de  $0 \leq \chi \leq \pi$  e depende do potencial intermolecular. O procedimento para calcular  $\chi$  para um potencial específico pode ser encontrado em diversos livros e artigos, vide por exemplo, Refs. [13, 64]. Em geral, depende da energia  $E$  do movimento relativo das moléculas e do parâmetro de impacto  $b$ , ou seja,  $\chi = \chi(b, E)$ . Quando um par é selecionado para colisão, o ângulo de deflexão  $\chi$  deve ser calculado para a energia  $E$  deste par e para o parâmetro de impacto gerado aleatoriamente seguindo a regra

$$b = b_m \sqrt{R_f}. \quad (5.1)$$

Assim, o cálculo deste ângulo para cada par selecionado consome um longo tempo de CPU. Para superar este problema, foi proposto calcular antecipadamente valores discretos do ângulo  $\chi_{ij} = \chi(b_i, E_j)$  para valores discretos do parâmetro de impacto  $b_i$  e da energia  $E_j$ . Os valores de energia podem ser distribuídos uniformemente entre 0 e  $E_{max}$ , ou seja,

$$E_j = (j - 1/2) \frac{E_{max}}{N_E}, \quad 1 \leq j \leq N_E. \quad (5.2)$$

No entanto, os valores do parâmetro de impacto  $b_i$  devem ser distribuídos de forma que cada ângulo  $\chi_{ij}$  seja igualmente provável para um dado  $E_j$ . Para isso, a regra (5.1) é utilizada, ou seja,  $N_b$  valores discretos de  $b_i$  são distribuídos de modo que

$$b_i^2 = \frac{b_M^2}{N_b} \left( i - \frac{1}{2} \right), \quad (5.3)$$

isto é,  $b_i^2$  são distribuídos de forma uniforme.

Quando os valores de  $b_i$  e  $E_j$  são escolhidos, a matriz  $\chi_{ij}$  é calculada aplicando-se o procedimento descrito nas Refs. [13, 64] e é armazenada na memória do computador. Quando um par de moléculas com energia  $E$  é selecionado para colisão, o ângulo  $\chi_{ij}$  é escolhido da matriz de acordo com as regras

$$i = N_b R_f + 1, \quad j = \frac{E}{E_{max}} N_E + 1, \quad (5.4)$$

onde  $E$  é a energia adimensional definida por  $E = mg^2/4\epsilon$ , onde  $\epsilon$  é a profundidade do poço de potencial.

Se por acaso  $j > N_E$ , então  $j = N_E$ . A distribuição de energia poderia ser não-uniforme se existesse uma regra simples para calcular o índice de  $j$  como função da energia  $E$ .

## 5.2 Potenciais arbitrários para mistura

Para colisões entre espécies  $\alpha$  e  $\beta$  iremos ter um parâmetro de impacto  $b_{M,\alpha\beta}$  e a seção de choque total será dada como  $\sigma_{\alpha\beta} = \pi b_{M,\alpha\beta}^2$ . Uma vez que um par de partículas é selecionado para colisão, suas velocidades são alteradas de acordo com a teoria clássica da colisão binária, vide capítulo 2 da Ref. [13]. O ângulo de deflexão  $\chi$  que determina a direção da velocidade relativa  $\mathbf{g}_{\alpha\beta}$  após uma colisão depende da energia cinética adimensional de colisão definida como

$$E_{\alpha\beta} = \frac{m_\alpha m_\beta g_{\alpha\beta}^2}{2(m_\alpha + m_\beta)\epsilon_{\alpha\beta}}, \quad (5.5)$$

onde  $\epsilon_{\alpha\beta}$  é dado na Tabela 2.1 para cada tipo de colisão. Uma vez que o cálculo do ângulo de deflexão  $\chi$  para uma colisão binária precisa de esforço computacional significativo, ele é pré-calculado e armazenado na memória do computador, como foi proposto na referência [37]. Valores regularmente distribuídos da energia são então considerados, ou seja,

$$E_{j,\alpha\beta} = (j - 1/2) \frac{E_{m,\alpha\beta}}{N_E}, \quad (5.6)$$

onde  $1 \leq j \leq N_E$ ,  $E_{m,\alpha\beta}$  é a máxima energia para uma colisão  $\alpha - \beta$  e  $N_E$  é um inteiro. Os valores do parâmetro de impacto  $b_{i,\alpha\beta}$  são distribuídos como

$$b_{i,\alpha\beta}^2 = \frac{b_{M,\alpha\beta}^2}{N_b} \left( i - \frac{1}{2} \right), \quad (5.7)$$

onde  $b_{M,\alpha\beta}$  é o cut-off do parâmetro de impacto e  $N_b$  é um inteiro. Para escolher o ângulo de deflexão  $\chi_{ij}$  de um par selecionado para colisão as seguintes

regras são usadas

$$i = N_b R_n + 1, \quad j = \frac{E_{\alpha\beta}}{E_{m,\alpha\beta}} N_E + 1, \quad (5.8)$$

onde  $R_n$  é um número aleatório e  $E_{\alpha\beta}$  é energia adimensional deste par.

### 5.3 Esquema numérico

É mais conveniente calcular o ângulo de deflexão  $\chi$  usando uma energia adimensional, por exemplo,  $E = mg^2/4\epsilon$ . Os valores de  $E_{max}$  devem ser escolhidos de modo a abarcar o conjunto todo (ou praticamente todo) de intervalo de variação de energia  $E$ . No estado de equilíbrio, a energia  $E$  é distribuída de acordo com a seguinte função de distribuição

$$f(E) = \frac{E}{T^{*2}} \exp\left(-\frac{E}{T^*}\right), \quad T^* = \frac{k_B T}{\epsilon}, \quad (5.9)$$

onde  $T^*$  é a temperatura reduzida. Assim, se  $E_{max} = 15T^*$ , apenas a fração  $5 \times 10^{-6}$  das colisões terá a energia maior que  $E_{max}$ . Usando tal estimativa, não é difícil encontrar o valor ideal de  $E_{max}$ .

O valor de  $b_m$  deve ser escolhido com mais cuidado, porque o número de pares a serem testados para a colisão, e portanto o tempo de simulação, depende fortemente deste parâmetro. Como foi mostrado na Ref. [64], para grandes valores da energia relativa, digamos  $E = 100$ , o ângulo de deflexão  $\chi$  tende rapidamente a zero e  $b_m$  pode ser pequeno, enquanto que para valores pequenos, por exemplo,  $E = 0, 1$ , a diminuição do ângulo  $\chi$  é lenta e  $b_m$  deve ser grande. Para a condição considerada aqui, ou seja, o hélio em  $T_0 = 300$  K, a temperatura reduzida é  $T^* = 29,35$ . De acordo com a distribuição (5.9), a energia mais provável  $E$  é exatamente a temperatura reduzida  $T^*$  e apenas 2% das colisões tem a energia  $E < 0,2T^*$ . A figura 5.1 mostra o ângulo de deflexão  $\chi$  vs o parâmetro de impacto  $b$  para a energia mais provável  $E = T^*$  e para a energia  $E = 0,2T^*$ , ou seja, estas são curvas típicas para 98% das colisões. Como pode ser visto, o ângulo de deflexão é pequeno em  $b = 1,5d$ , e

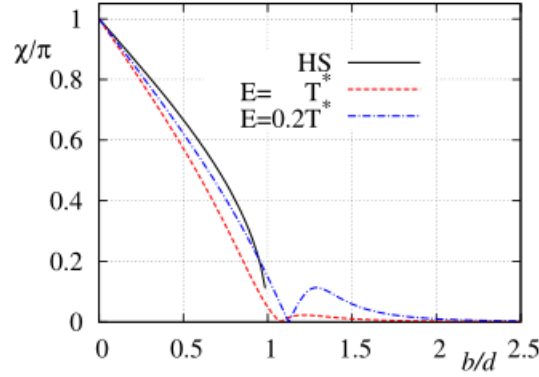


Figura 5.1: Ângulo de deflexão  $\chi$  vs parâmetro de impacto  $b$  para  $T^* = 29,35$ . Publicado originalmente em [37].

praticamente se torna nulo em  $b = 2d$ . Assim, este comportamento de  $\chi$  serve como um ponto de referência para a escolha de  $b_M$ . É claro que idealmente gostaríamos de ter  $b_M$  o maior possível, porém a partir de um certo valor se torna inviável.

## 5.4 Resultados

Dois problemas de referência, a saber Couette e transferência de calor, foram resolvidos para os parâmetros  $\epsilon$  e  $d$  do potencial LJ correspondente ao gás hélio, os quais são apresentados na Tabela 5.1.

Tabela 5.1: Dados para os problemas de referência

quantidade	valor	fonte
Massa molecular	$m/u=4,002602$	NIST, 2014
Unidade de massa atômica	$u=1,660538921(73)\times 10^{-27}$ kg	NIST, 2014
Parâmetro de LJ	$d=0,2576$ nm	[2, 64]
Parâmetro de LJ	$\epsilon/k=10,22$ K	[2, 64]
Constante de Boltzmann	$k_B=1,380\,6488(13)\times 10^{-23}$ J/K	NIST, 2014
Viscosidade para LJ	$\mu=19,98$ $\mu$ Pa $\cdot$ s	[64]
Viscosidade para HS	$\mu=14,16$ $\mu$ Pa $\cdot$ s	[64]
Conduti. térmica para LJ	$\kappa=0,1566$ W/(m $\cdot$ K)	[64]
Conduti. térmica para HS	$\kappa=0,1113$ W/(m $\cdot$ K)	[64]
Coef. de salto de temp. de LJ	$\zeta_T=1,91$	[159, 160]
Coef. de salto de temp. de HS	$\zeta_T=1,890$	[159, 161]
Coef. de desliz. de veloc. de LJ	$\sigma_p=1,00$	[159]
Coef. de desliz. de veloc. de HS	$\sigma_p=0,9873$	[159, 162]
Temperatura de equilíbrio	$T_0=300$ K	

Para comparar o esforço computacional para o potencial LJ com aquele para HS, os problemas de referência foram também resolvidos para as moléculas de HS com a mesma massa molecular  $m$  e com o diâmetro igual a  $d$  apresentados na Tabela 5.1. A temperatura de equilíbrio  $T_0$  do gás foi assumida como sendo igual a 300 K. A separação entre as placas foi de  $H = 1$  mm. Três valores da pressão foram considerados, a saber, 100, 200 e 400 Pa. Os valores correspondentes do livre caminho médio equivalente calculados para o potencial LJ do gás hélio com uso da fórmula (2.1) são 0,2231; 0,1115 e 0,05578 milímetros, para cada pressão respectivamente. Assim, as pressões consideradas correspondem aos parâmetros de rarefações  $\delta$  iguais a 4,5, 8,97 e 17,9 respectivamente. A diferença de temperatura no problema de transferência de calor foi  $\Delta T/T_0 = 1/3$  e a velocidade da placa no de Couette foi  $U_w/v_0 = 1/3$ .

Os cálculos de DSMC foram realizados para 20.000 partículas, 200 células, a energia máxima igual a  $E_{max} = 400$ ,  $N_E = 400$  o número de pontos para a energia, o máximo fator de impacto igual a  $b_m = 1,5d$  e  $N_b = 200$ . Os resultados dos cálculos para o fluxo de calor  $q_x$  e para o tensor de cisalhamento

$P_{xy}$  são apresentados nas Tabelas 5.2 e 5.3, respectivamente. Os valores de  $q_x$  e  $P_{xy}$  calculados pelas leis de Fourier e Newton com os coeficientes  $\kappa$ ,  $\mu$ ,  $\zeta_T$  e  $\sigma_P$  dados na Tabela 5.1 também são apresentados nas Tabelas 5.2 e 5.3. Pode-se verificar que a discrepância entre os resultados DSMC e aqueles calculados analiticamente não excedeu 0,6% para  $q$  e 0,9% para  $P_{xy}$ . A fim de verificar, se os parâmetros utilizados nestes cálculos são suficientes para a incerteza 1%, cálculos adicionais foram realizados variando cada parâmetro do esquema numérico. Observou-se que o tempo de CPU foi sensível ao parâmetro  $b_M$  e aumentou em 50% ao aumentarmos  $b_M$  de 1,5 à 3, enquanto os outros parâmetros não afetam o tempo de CPU.

Os resultados destes testes mostraram que o fluxo de calor  $q_x$  e tensor de cisalhamento  $P_{xy}$  não variaram dentro da precisão numérica de 1%.

Note que, os valores de  $q_x$  e  $P_{xy}$  para o potencial HS apresentados nas Tabelas 5.2 e 5.3 são bastante diferentes daqueles para LJ, apesar do fato de que  $\chi = 0$  para HS e  $\chi \ll 1$  para LJ quando  $b > d$ . A diferença significativa de  $q_x$  e  $P_{xy}$  é explicada pela diferença da função  $\chi = \chi(b/d)$  para HS e LJ na faixa de  $0 \leq b/d \leq 1$ , como pode ser visto na Figura 5.1.

Nas últimas colunas das Tabelas 5.2 e 5.3, a razão entre o tempo de CPU de LJ para HS é dada. Em contraste com a opinião estabelecida, vide por exemplo, Ref. [157, 158], o uso do potencial LJ aumenta o tempo de processamento em apenas 50% no máximo para os problemas aqui considerados. O aumento do tempo de CPU pode ser maior para outros problemas e/ou gases, mas não duas ordens de grandeza como acontece caso o ângulo de deflexão fosse calculado para cada colisão.

Tabela 5.2: Fluxo de calor  $q_x$  vs pressão  $p$ . CPU é razão de tempos de CPU entre LJ e HS. Gás Hélio.

$p$ (Pa)	$q_x$ (kW/m <sup>2</sup> )				CPU
	LJ		HS		
	DSMC	Fourier	DSMC	Fourier	
100	8,415	8,452	6,928	6,968	1,25
200	10,93	10,98	8,555	8,571	1,28
400	12,90	12,91	9,696	9,685	1,34

Tabela 5.3: Tensor de cisalhamento  $P_{xy}$  vs pressão  $p$ . CPU é razão de tempos de CPU entre LJ e HS. Gás Hélio.

$p$ (Pa)	$P_{xy}$ (Pa)				CPU
	LJ		HS		
	DSMC	Newton	DSMC	Newton	
100	5,159	5,142	4,024	4,017	1,36
200	6,111	6,080	4,578	4,559	1,39
400	6,754	6,690	4,934	4,890	1,46

# Capítulo 6

## Coeficientes de transporte

Aqui estudaremos a viscosidade e a condutividade térmica, que são chamados de coeficientes de transporte de um fluido, e veremos como calculamos essas quantidades para misturas usando a DSMC com potencial AI.

### 6.1 Viscosidade

#### 6.1.1 Viscosidade e escoamento de Couette

Para o cálculo da viscosidade iremos considerar o escoamento particular chamado **escoamento de Couette**, que já explicamos no capítulo 3, mas que iremos descrever rapidamente novamente aqui. No escoamento de Couette, vide por exemplo [42], temos duas placas planas infinitas paralelas separadas por uma distância  $d$ , na direção  $y$ . Entre as placas, ocupando todo o espaço entre elas, temos o fluido, que por enquanto pode ser tanto gasoso como líquido. Uma das placas se move na direção  $x$ , perpendicular a  $y$ , com velocidade constante  $U$ , enquanto a outra fica em repouso, tudo isso em relação a um referencial inercial. Estes escoamentos são ideais. Qualquer outro efeito, como por exemplo a força gravitacional, é ignorado.

Vamos admitir que as moléculas que constituem o fluido sofram **reflexão difusa** nas placas. Isto é, quando as moléculas do fluido atingem as placas as mesmas são espalhadas em qualquer direção, perdendo completamente a informação das velocidades com as quais chegaram, e com módulos de



velocidade satisfazendo a distribuição de velocidades (Maxwelliana) para a temperatura da placa em questão. Também supomos que o fluido e as placas se encontram inicialmente à mesma temperatura  $T_0$ .

Estamos supondo que a placa de cima, na figura, se move, enquanto a placa de baixo permanece em repouso. O movimento da placa de cima irá colocar todo o fluido em movimento. Quanto mais próximo da placa superior, maior será a velocidade do fluido, enquanto mais próximo da placa inferior, menor será a velocidade do fluido. Numa distância infinitesimalmente próxima da placa em repouso, a velocidade do fluido é zero.

A figura a seguir mostra o perfil de velocidade para o escoamento de Couette, que se aproxima muito de uma linha reta.

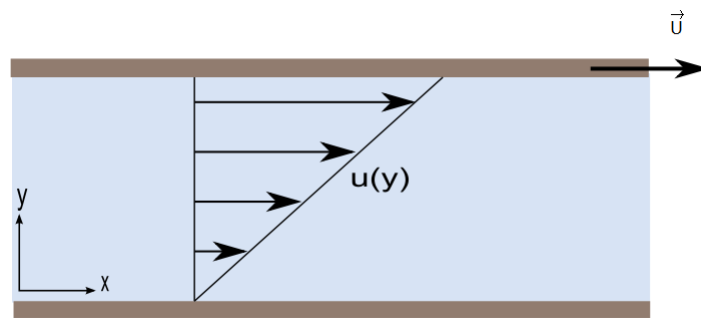


Figura 6.1: Perfil aproximado da velocidade para o escoamento Couette.

Uma coisa importante a ser dita é que estamos falando de velocidade **macroscópica** do fluido, e não a velocidade de moléculas individuais. Todo o conceito de viscosidade pressupõe que o fluido seja um contínuo, isto é, que esteja no chamado limite hidrodinâmico, correspondente a  $\delta \gg 1$ , ou dito de outra forma, correspondente a  $\text{Kn} \ll 1$ . Na figura, o movimento do fluido causado pelo movimento da placa superior irá causar uma força  $\mathbf{F}$  sobre uma área  $A$  da placa inferior em repouso, que terá a mesma direção e o mesmo sentido de  $\mathbf{U}$ . Verifica-se que a força  $\mathbf{F}$  valerá, em módulo

$$F = \mu A \frac{U}{d}, \quad (6.1)$$

onde o coeficiente de proporcionalidade  $\mu$  é chamado de **viscosidade**, ou **viscosidade dinâmica** do fluido.

A expressão anterior define uma viscosidade média. Se quisermos a viscosidade em qualquer ponto devemos substituí-la por

$$F = \mu A \frac{\partial u}{\partial y}, \quad (6.2)$$

onde agora  $u$  é o módulo da velocidade do fluido na direção  $x$  e  $F$  é o módulo da força causada sobre uma área  $A$  de uma superfície imaginária, paralela às placas, na altura considerada.

Dividindo a equação toda por  $A$  temos

$$\tau = \frac{F}{A} = \mu \frac{\partial u}{\partial y}, \quad (6.3)$$

onde  $\tau$  é a tensão de cisalhamento. A equação 6.3 é chamada de Lei de Newton (da viscosidade) em homenagem a Sir Isaac Newton (1643-1727) que foi quem a descobriu.

No sistema internacional de unidades (S.I.), ou sistema métrico, a viscosidade, ou viscosidade dinâmica, é medida em pascal segundo (Pa.s). Outra unidade comum é o poise (P), do CGS. Este se relaciona com o Pa.s por

$$1\text{Pa.s} = 10\text{P}.$$

### 6.1.2 Viscosidade em gases diluídos

A viscosidade em gases diluídos pode ser estimada através do Método de Chapman-Enskog. A primeira aproximação para a viscosidade vale, vide por exemplo [3],

$$[\mu]_1 = \frac{5k_B T}{8\Omega^{(2,2)}}, \quad (6.4)$$

onde  $\Omega^{(2,2)}$  é uma “integral omega”, que depende do potencial, e que para gás de esferas rígidas [3] vale

$$\Omega^{(2,2)} = 2 \left( \frac{k_B T \pi}{m} \right)^{1/2} d^2,$$

onde  $d$  é o diâmetro da molécula de esferas rígidas. Substituindo a integral omega, temos

$$[\mu]_1 = \frac{5(k_B T m / \pi)^{1/2}}{16d^2}, \quad (6.5)$$

ou seja, a viscosidade de um gás rarefeito segundo o modelo de esferas rígidas é proporcional a  $T^{1/2}$ . Na realidade, porém, a dependência da viscosidade com a temperatura não é essa [54], e por isso é muito importante a utilização de um potencial mais físico, como os potenciais AI. O potencial AI dá a dependência correta, como mostrado por exemplo na dissertação de Mestrado de Benites, [163].

### 6.1.3 Determinação da viscosidade através da DSMC

Para o cálculo da viscosidade usando o método da DSMC, o que se faz é a simulação do escoamento de Couette. O espaço entre as placas é dividido em diversas células que são usadas para o cálculo da velocidade do gás em uma dada região. Com isso temos imediatamente o gradiente de velocidade. O próximo passo é calcular a força sobre a placa inferior em repouso, ou sobre uma superfície imaginária paralela à mesma. Para isso, no primeiro caso, é feito diretamente o cálculo da quantidade de movimento transmitida a esta placa, lembrando que na DSMC sabemos a cada instante a posição e a velocidade de cada partícula modelo, por unidade de tempo. Com isso temos a força, e assim, considerando uma determinada área de placa podemos calcular a viscosidade diretamente usando a definição, dada pela lei de Newton. Para o caso da superfície imaginária paralela à placa, faz-se a contabilidade das partículas que cruzam a superfície num sentido (indo em direção a placa em repouso) e as em sentido oposto, e se subtrai as quantidades de movimento das que vão num sentido das que vão noutro sentido, de modo a

ter a quantidade de movimento resultante sobre a superfície imaginária, num determinado tempo.

São vários os parâmetros a serem levados em conta. Parâmetros determinantes do problema são: A velocidade da placa em relação à velocidade máxima provável das moléculas do gás, que irá determinar se o problema é linear ou não (a Lei de Newton é linear, assim é necessário que a variação da velocidade ao longo de um livre caminho médio seja pequena); a temperatura inicial do gás e das placas,  $T_0$ , para qual usamos 300K, o gás ou mistura gasosa considerada, o modelo de colisão intermolecular utilizado, o modelo de reflexão do gás nas paredes (nós iremos sempre nos limitar a reflexão difusa), e o parâmetro de rarefação. Para que a viscosidade possa ser definida corretamente segundo a lei de Newton é necessário que se esteja no regime hidrodinâmico. Verificou-se que, nesse caso, o erro da DSMC, supondo regime hidrodinâmico, é da ordem de  $1/\delta^2$ . Ou seja, se nos contentarmos com uma precisão de 1% então  $\delta = 10$  já seria uma boa aproximação para regime hidrodinâmico. Nos cálculos realizados nos nossos artigos [37, 38] foi considerado  $\delta = 40$  para regime hidrodinâmico.

Parâmetros específicos da DSMC são: número de amostras; número de células; no caso de potencial AI, ou LJ, o número de pontos para a energia, o número de pontos para o parâmetro de impacto, a máxima energia relativa, o máximo parâmetro de impacto e para o modelo HS precisamos saber os diâmetros das moléculas. Como sabemos, o erro de Monte Carlo é proporcional a  $1/\sqrt{N}$ , onde  $N$  é o número de amostras. O que fizemos foi lançar vários processos, diferindo apenas pela semente do gerador de números aleatórios e, com isso, foi possível escolher um número de amostras que desse um erro inferior a 0,5%. É claro que o ideal seria termos o maior número de amostras possível. Porém, por questões de tempo, é preciso se limitar. Sobre o número de células, deve-se utilizar um número de células que seja suficientemente grande para que possamos calcular o gradiente de velocidade, mas que também não seja grande de mais ao ponto de termos poucas partículas por célula. Para que a DSMC funcione bem, a recomendação é que haja pelo

menos 10 partículas modelo por célula.

Diferente do que alguém poderia pensar, o número total de partículas não depende da rarefação. Isto porque lidamos com partículas modelo e não moléculas reais. Ocorre com o número total de partículas algo similar ao número de amostras. O ideal é termos o maior número possível, porém quanto maior for o número de partículas maior será também o tempo de simulação.

Tanto no potencial de LJ como nos potenciais AI, as partículas interagem a qualquer distância. Quer dizer, todas as partículas estão o tempo todo em colisão umas com as outras. É claro que seria impossível fazer uma simulação assim. Por isso é necessário fazer um cutoff no potencial, que irá dizer qual é o maior parâmetro de impacto possível. A partir daí o potencial é nulo e não ocorre colisão alguma. Novamente desejaríamos o maior valor possível, porém isso influencia diretamente o tempo de simulação. O que se faz é vários testes até achar um valor ótimo de máximo parâmetro de impacto, que não torne a simulação inviável e além do qual não haja mudança nos resultados dentro da precisão desejada. Isso é feito por tentativa e erro. O mesmo é feito para a energia máxima relativa, para os números de pontos de energia e de parâmetro de impacto.

#### 6.1.4 Resultados

Dois problemas de referência foram resolvidos, sendo o primeiro o de Couette, que permitiu o cálculo da viscosidade usando potencial AI para a mistura He-Ar, bem como a comparação com HS.

Para uma mistura binária, três matrizes de ângulo de deflexão  $\chi_{ij}$  são calculadas para os três tipos de colisões, ou seja, He-He, Ar-Ar e He-Ar, aplicando o potencial (2.37) e utilizando os seguintes parâmetros:  $E_{m,\alpha\beta} = 600$ ,  $N_E=600$ ,  $b_m = 3r_0$ ,  $N_b = 900$ .

Os cálculos foram realizados para a fração molar  $C_0$  igual a 0, 0,25, 0,5, 0,75 e 1 e à temperatura de 300 K. Os valores da viscosidade  $\mu$  são relatados

na segunda coluna das tabela 6.1. É importante ressaltar que esses resultados são originais, pois foi a primeira vez que esse cálculo foi feito com base em potencial AI.

Tabela 6.1: Viscosidade  $\mu$  da mistura He-Ar vs fração molar  $C$  calculados via DSMC, e dados da literatura.

$C$	$\mu$ [ $\mu\text{Pa} \cdot \text{s}$ ]				$\Delta\mu/\mu$ [%]		
	DSMC	Refs. [62, 63]	Ref. [54]	Ref. [66]	[62, 63]	[54]	[66]
0	22,68	22,669	22,83	22,772	0,05	0,7	0,4
0,25	23,22	-	23,33	23,169	-	0,5	0,2
0,5	23,53	-	23,67	23,420	-	0,6	0,5
0,75	23,18	-	23,30	23,057	-	0,5	0,5
1	19,91	19,910	20,04	20,172	<0,02	0,7	1,3

Para termos certeza de que nosso esquema numérico foi satisfatório, fizemos também uma comparação com os resultados para HS, com os da literatura. Os resultados para  $u = 0, 2v_0$  são mostrados na tabela 6.2.

Tabela 6.2: Dados do cálculo de viscosidade pela DSMC para HS e comparação com viscosidade de referência de [70].

	$C_0=0$	$C_0=0,25$	$C_0=0,5$	$C_0=0,75$
$\mu_0(\mu \text{ Pa} \cdot \text{s})$	22,68	22,81	22,77	22,22
$\Pi$	0,02382	0,0237252	0,0236592	0,0236340
$du_y/dx$	0,953918	0,948784	0,944899	0,947806
$\mu$ ( $\mu \text{ Pa} \cdot \text{s}$ ) <sub>DSMC</sub>	22,66	22,82	22,81	22,16
$(\mu - \mu_0)/\mu_0$ %	-0,09	0,04	0,18	-0,27

A maior diferença chega a  $-0,27\%$ , o que mostra que nosso esquema produz resultados dentro da precisão anunciada de  $-0,5\%$ .

## 6.2 Condutividade térmica

### 6.2.1 Condutividade térmica em gases diluídos

Usando o mesmo método de Chapman-Enskog, que foi utilizado para a

viscosidade, a primeira aproximação para a condutividade térmica em gás diluído é dada por [3] como

$$[\kappa]_1 = \frac{25(3k_B/2m)k_B T}{16\Omega^{(2,2)}}, \quad (6.6)$$

ou, para o caso de esferas rígidas

$$[\kappa]_1 = \frac{25(\pi m k_B T)^{1/2}}{32\pi d^2} c_v, \quad (6.7)$$

ou seja, a condutividade térmica para gás de esferas rígidas depende de três fatores, a massa das moléculas, a temperatura, e a seção de choque das moléculas. Para um dado gás a condutividade térmica, segundo o modelo de HS, é proporcional a  $T^{1/2}$ . Novamente, isso não é o caso na realidade, de modo que é muito importante o uso de um potencial mais realístico, como os potenciais AI.

### 6.2.2 Determinação da condutividade térmica através da DSMC

Praticamente tudo que dissemos para o caso de cálculo da viscosidade também se aplica ao caso do cálculo da condutividade térmica. As diferenças são que agora estamos tratando de transferência plana de calor, vide por exemplo [42], e não mais de escoamento plano de Couette. O esquema é praticamente o mesmo. Agora, porém, ambas as placas estão em repouso, e uma das placas é mantida a uma temperatura  $T_0 + \Delta T/2$  e a outra a  $T_0 - \Delta T/2$ , vide figura 3.3.1. Ao invés do cálculo do tensor de cisalhamento, agora calculamos diretamente o fluxo de calor, que é determinado através da energia cinética média das moléculas em relação ao referencial de centro de massa das mesmas. Isso é um detalhe importante que merece ser enfatizado. Existe uma diferença entre calor e energia térmica. A energia é calculada simplesmente pela energia cinética das moléculas, sem a necessidade de se subtrair a energia puramente translacional do centro de massa. Várias moléculas que

se movessem na mesma direção e sentido e com a mesma velocidade teriam energia cinética, mas a temperatura do conjunto seria zero.

A Lei de Fourier vale somente se a diferença de temperatura é baixa. Assim devemos manter  $\Delta T$  suficientemente baixa para atender essa suposição.

### 6.2.3 Resultados

O segundo problema de referência calculado em nosso artigo [38] foi o da transferência plana de calor para a mistura He-Ar. Para o cálculo do coeficiente de condutividade térmica, a mistura foi perturbada por um desvio de temperatura das placas, isto é, a placa em  $x = -H/2$  mantida a uma temperatura  $T_0 + \Delta T/2$ , enquanto a outra placa é mantida a uma temperatura  $T_0 - \Delta T/2$ . A diferença de temperatura  $\Delta T$  deve ser pequena o suficiente para evitar uma contribuição de termo não linear para o fluxo de calor  $q_x$ . O fluxo de calor  $q_x$  foi calculado para cada célula durante a simulação do movimento livre, ou seja, a energia de todas as partículas que atravessam uma célula é contada e somada. O número de amostras  $5 \times 10^4$  garantiu que a dispersão estatística fosse inferior a 0,5%. O intervalo entre as placas foi dividido em 400 células. O número de partículas modelo foi 40.000, ou seja, cerca de cem por célula. O incremento de tempo foi de  $\Delta t = 0,002H/v_0$ . Cálculos teste com números maiores de células e partículas, e com um incremento de tempo menor mostraram que os valores indicados acima garantiram um erro numérico inferior a 0,5%.

Os resultados de condutividade térmica são mostrados na tabela 6.3 bem como a comparação com outros resultados da literatura. Da mesma forma que para o caso da viscosidade, é importante ressaltar que esses resultados são absolutamente originais, pois foi também a primeira vez que esse cálculo foi feito com base em potencial AI.



Tabela 6.3: Condutividade térmica  $\kappa$  da mistura He-Ar vs fração molar  $C$ . DSMC e literatura. Os dados de [62, 63, 66] são teóricos, enquanto [54] são empíricos.

$C$	$\lambda$ [mW/m K]				$\Delta\lambda/\lambda$ [%]		
	DSMC	Refs. [62, 63]	Ref. [54]	Ref. [66]	[62, 63]	[54]	[66]
0	17,74	17,709	17,83	17,789	0,2	0,5	0,3
0,25	32,60	-	32,71	31,797	-	0,3	2,5
0,5	54,34	-	54,36	52,976	-	0,04	2,5
0,75	89,63	-	89,28	88,284	-	0,4	1,5
1	155,52	155,66	156,66	157,71	0,1	0,7	1,4

Para termos certeza da eficácia do esquema utilizado, nós calculamos para HS também, e comparamos com a literatura. Os nossos resultados são mostrados na quarta linha da tabela 6.4.

Tabela 6.4: Dados do cálculo de condutividade térmica, DSMC, HS. Viscosidade de referência de  $\mu_0$  de [65].

	$C_0=0$	$C_0=0,25$	$C_0=0,5$	$C_0=0,75$
$\mu_0(\mu\text{Pa.s})$	22,68	22,81	22,77	22,22
q	0,043182	0,054902	0,063630	0,064867
$dT/dx$	0,913218	0,919956	0,918549	0,913046
$\kappa(\text{W/mK})_{\text{DSMC}}$	$1,7856 \times 10^{-2}$	$2,9245 \times 10^{-2}$	$4,7743 \times 10^{-2}$	$8,08398 \times 10^{-2}$
$\kappa_0(\text{W/mK})_1$	$17,86 \times 10^{-3}$	$29,27 \times 10^{-3}$	$47,62 \times 10^{-3}$	$80,67 \times 10^{-3}$
$(\kappa - \kappa_0)/\kappa_0(\%)$	-0,02	-0,08	0,25	0,21

A diferença para a condutividade térmica da literatura, para HS, atinge um máximo de 0,25%, que está de acordo com a nossa precisão anunciada, de 0,5%. No capítulo 7 será mostrado que a diferença de temperatura  $0,2T_0$  é suficiente para garantir uma solução linear, necessária para a utilização da lei de Fourier.

## Capítulo 7

# Fenômenos de transporte através de misturas

### 7.1 Escoamento plano de Couette

O escoamento plano de Couette é um dos escoamentos clássicos e mais simples da Mecânica dos Fluidos. Nós já descrevemos esse escoamento no capítulo 6. Agora, porém, a velocidade  $U$  da parede não precisa mais ser pequena em relação à  $v_0$ , e estamos interessados no intervalo inteiro de rarefação.

Nós calculamos  $\Pi$  como função dos parâmetros  $C_0$ ,  $U/v_0$  e  $\delta$  para ambos potenciais HS e AI com um erro numérico menor que 0,5%. Além disso, os perfis de velocidade, temperatura e fração molar são relatados. A comparação dos resultados com base nesses dois potenciais diferentes nos permitirá estudar a influência destes potenciais sobre o fluxo de Couette.

#### 7.1.1 Limite hidrodinâmico

Para cobrir toda a gama da rarefação do gás  $\delta$ , o problema deve ser resolvido no regime hidrodinâmico também, ou seja, quando  $\delta \gg 1$ . Algumas conclusões sobre a influência do potencial intermolecular no problema em questão podem ser feitas com base na presente solução limite, a qual se baseia nas equações de Navier-Stokes contendo os coeficientes de trans-

porte, tais como a viscosidade  $\mu$ , condutividade térmica  $\kappa$ , e coeficiente de difusão térmica  $k_T$ . Estes coeficientes são funções desconhecidas da temperatura  $T$  e composição química  $C$  da mistura. Além disso, estas funções não são analíticas para o potencial AI de modo que uma solução analítica rigorosa da equação de Navier-Stokes não é possível. Por isso, vamos nos restringir a uma aproximação assumindo a seguinte dependência (que é simples e interpola bem os dados experimentais e numéricos) da viscosidade  $\mu$  e condutividade térmica  $\kappa$  com a temperatura

$$\mu(T) = \mu_0 \left( \frac{T}{T_0} \right)^\omega, \quad \kappa(T) = \kappa_0 \left( \frac{T}{T_0} \right)^\omega, \quad (7.1)$$

onde  $\mu_0$  e  $\kappa_0$  correspondem à temperatura de equilíbrio  $T_0$ . De um modo geral a quantidade  $\omega$ , que nesse caso carrega a informação do potencial, não é constante, mas  $\omega$  varia pouco com a temperatura, vide tabela 7.11, e como nesse problema a temperatura também varia pouco, vide figura 7.1, podemos considerar  $\omega$  constante. Seu valor para  $T_0 = 300$  K foi calculado a partir dos dados experimentais de viscosidade relatados na Ref. [54] e são dados na última coluna da Tabela 7.3.

A solução hidrodinâmica baseia-se nas equações constitutivas, ou seja, as leis de Newton e Fourier, e nas conservações de momento linear e energia

$$\frac{dP_{xy}}{dx} = 0, \quad \frac{dq_x}{dx} + P_{xy} \frac{du_y}{dx} = 0. \quad (7.2)$$

De acordo com os dados empíricos [54], o fator de difusão  $\alpha_T$  depende fracamente da temperatura, de modo que pode ser assumido constante. Os dados de razão de termodifusão para HS relatados na Ref. [65] e aqueles para potencial AI relatado na Ref. [38] são apresentados na Tabela 7.3.

Para levar em conta uma rarefação moderada, as equações diferenciais são resolvidas aplicando-se as condições de contorno de deslizamento de velocidade, vide por exemplo [42]

$$u_y = \pm \left( \frac{U}{2} - \sigma_p \ell \frac{du_y}{dx} \right) \quad \text{em} \quad x = \pm \frac{H}{2}. \quad (7.3)$$

e salto de temperatura

$$T = T_0 \mp \zeta_{\text{T}} \ell \frac{dT}{dx} \quad \text{em} \quad x = \pm \frac{H}{2}, \quad (7.4)$$

onde,  $\sigma_{\text{p}}$  e  $\zeta_{\text{T}}$  são os coeficientes de deslizamento de velocidade e de salto de temperatura, respectivamente, e  $\ell$  é o livre caminho equivalente (2.1). Fisicamente, essas condições significam que a velocidade do gás imediatamente próximo à parede não é igual a velocidade da parede, e que a temperatura imediatamente próxima da parede também não é igual à temperatura da parede. Uma análise crítica dos dados numéricos e experimentais sobre esses coeficientes podem ser encontrados na Ref. [159]. De acordo com os dados numéricos obtidos na Ref. [164] a partir da equação modelo McCormack, o coeficiente de deslizamento  $\sigma_{\text{p}}$  não é sensível ao potencial intermolecular. Seus valores válidos tanto para HS como para potencial AI são apresentados na Tabela 7.3. O coeficiente de salto  $\zeta_{\text{T}}$  calculado na Ref. [165] é fortemente afetado pelo potencial e está apresentado na Tabela 7.3 para HS e para o chamado potencial realístico (PR) [165], que é o nome que se dá quando se utilizam as fórmulas de interpolação dadas em [54].

Mesmo após a simplificação (7.1), as equações são resolvidas numericamente para uma velocidade de parede arbitrária  $U$ . No entanto, se introduzirmos o parâmetro

$$\xi = \frac{U}{v_0(1 + 2\sigma_{\text{p}}/\delta)}, \quad (7.5)$$

então as soluções das equações sujeitas às condições de contorno (7.3) e (7.4) podem ser expandidas com relação a este parâmetro. Se omitirmos os termos de ordem  $\xi^4$  e os termos de ordem  $1/\delta^2$ , obtém-se

$$P_{xy} = -\xi \frac{p_0}{\delta} \left[ 1 + \xi^2 \frac{\omega \text{Pr}}{15} \left( 1 + 2 \frac{3\zeta_{\text{T}} - \sigma_{\text{p}}}{\delta} \right) + O(\xi^4) \right], \quad (7.6)$$

$$u_y(x) = \xi v_0 \frac{x}{H} \left[ 1 - \xi^2 \frac{\omega \text{Pr}}{30} \left( 1 - 4 \frac{x^2}{H^2} + 4 \frac{\sigma_{\text{p}}}{\delta} \right) + O(\xi^4) \right], \quad (7.7)$$

$$T(x) = T_0 \left[ 1 + \xi^2 \frac{\text{Pr}}{10} \left( 1 - 4 \frac{x^2}{H^2} + 4 \frac{\zeta_{\text{T}}}{\delta} \right) + O(\xi^4) \right], \quad (7.8)$$

$$q_x(x) = \xi^2 \frac{v_0 p_0}{\delta} \frac{x}{H} + O(\xi^4). \quad (7.9)$$

Aqui,  $c_p = 5k_B/2m$  é o calor específico a pressão constante. Este número é muito próximo de  $2/3$  para um gás único e, nesse caso, depende fracamente do potencial molecular. No entanto, no caso da mistura, difere desse valor e depende significativamente do potencial. Os valores para HS e AI são apresentados na Tabela 7.3. Para calcular o número de Prandtl para o potencial AI, a viscosidade e a condutividade térmica calculadas no trabalho [38], e dadas na Tabela 7.3, foram utilizadas.

A viscosidade e condutividade térmica utilizadas para calcular o número de Prandtl para HS foram calculadas usando uma expansão polinomial de Sonine de maior ordem Ref. [3, 8]. As expressões dos termos de primeira ordem podem ser encontradas em muitos livros e artigos, vide por exemplo, Eqs. (7.3-82) e (7.3-87) no livro [3], Eqs. (70) e (71) em Ref. [110], Eq. (145) em Ref. [70] e Eq. (198) em Ref. [65]. Essas expressões necessitam dos diâmetros moleculares  $d_1$  e  $d_2$  que são extraídos a partir da expressão exata da viscosidade para um gás único de esferas rígidas

$$\mu = 0,126668 \frac{\sqrt{2mk_B T}}{d^2} \quad (7.10)$$

obtida em [64, 166]. Assumindo que no limite de gases individuais  $C_0 = 0$  e  $C_0 = 1$  as viscosidades de ambos AI e HS são as mesmas, os diâmetros são dados como  $d_1 = 0,2173$  nm e  $d_2 = 0,3618$  nm para He e Ar, respectivamente. Isto ocorre porque é justamente desta forma que os diâmetros moleculares para HS são calculados, ou seja, eles são ajustados pela viscosidade. As correções relacionadas com expansões polinomiais de Sonine de ordem superior calculados nas Refs. [65, 70] foram utilizadas para calcular a viscosidade e condutividade térmica para as frações molares intermediárias  $C_0 = 0,25, 0,5$  e  $0,75$ . Os valores correspondentes são apresentados na Tabela 7.3.

Usando a Eq. (7.8) e a condição  $\int_{-H/2}^{H/2} C(x) dx = C_0 H$  que provem do fato da massa ou quantidade de matéria se conservar, a fração molar é obtida

como

$$C(x) = C_0 + \xi^2 k_t \frac{2\text{Pr}}{5} \left( \frac{x^2}{H^2} - \frac{1}{12} \right) + O(\xi^4). \quad (7.11)$$

Assim, o maior desvio da fração molar acontece nas paredes ( $x = \pm H/2$ ) e é duas vezes menor que isso no ponto médio ( $x = 0$ ). Como a razão de termodifusão é negativa temos,  $C(0) > C_0$  e  $C(H/2) < C_0$ . Usando os dados numéricos da Tabela 7.3 pode-se verificar que os desvios relativos da fração molar  $\Delta C/C_0$  atinge 5% e 3% para os potenciais do HS e AI, respectivamente. Assim, a variação da fração molar é muito pequena e pode ser desprezada.

Substituindo (7.6) em (3.2), o tensor de cisalhamento reduzido é obtido como

$$\Pi = \frac{1}{(\delta + 2\sigma_p)} \left[ 1 + \xi^2 \frac{\omega \text{Pr}}{15} \left( 1 + 2 \frac{3\zeta_t - \sigma_p}{\delta} \right) + O(\xi^4) \right]. \quad (7.12)$$

Esta expressão nos dá uma ideia sobre a influência do potencial. Uma vez que o coeficiente de deslizamento  $\sigma_p$  não é afetado pelo potencial, o primeiro termo na equação (7.12) não depende do mesmo. Os primeiros termos nos perfis de velocidade (7.7) e temperatura (7.8) também não são afetados pelo potencial. Uma vez que as quantidades  $\omega$ ,  $\text{Pr}$  e  $\zeta_t$  dependem do potencial, os termos da ordem  $\xi^2$  nas equações (7.7), (7.8) e (7.12) são afetados pelo potencial. Esta expressão (7.12) serve para mostrar que para  $U/v_0 = 0,2$  a contribuição dos termos não lineares é menor que 0,3%, o que significa que para o valor de velocidade da parede considerado, o problema pode ser considerado linear dentro da precisão assumida.

De acordo com a Eq.(7.9), o fluxo de calor  $q_x$  não contém o termo de primeira ordem em relação ao parâmetro pequeno  $\xi$ . O termo de segunda ordem não depende do potencial intermolecular de modo que esta quantidade não será analisada aqui.

### 7.1.2 Regime de molécula livre

No regime molecular livre ( $\delta \rightarrow 0$ ) todos os momentos são facilmente obtidos para a interação gás-superfície difusa, ver, por exemplo Ref. [13, 97].

De [13]

$$P_{xy} = m \left( \frac{N}{2V} \right) U \left( \frac{2R T_0}{m \pi} \right)^{1/2}, \quad (7.13)$$

onde  $R = N_a k_B$  é a constante dos gases. Escrevendo isso em termos de  $v_0$  obtemos

$$P_{xy} = \frac{U p_0}{v_0 \sqrt{\pi}}, \quad (7.14)$$

para o tensor pressão dimensional, ou

$$\Pi = \frac{1}{\sqrt{\pi}}, \quad (7.15)$$

para o adimensional.

Generalizando isso para mistura, o tensor pressão dimensional fica

$$P_{xy} = -p_0 U \frac{(C_0 \sqrt{m_1} + (1 - C_0) \sqrt{m_2})}{\sqrt{\pi m} v_0}, \quad (7.16)$$

onde  $m$  agora é a massa média definida em Eq.(2.3).

Partindo da mesma referência e de modo análogo, para a temperatura temos

$$T = T_0 \left[ 1 + \frac{1}{6} \frac{U^2}{v_0^2} \right], \quad (7.17)$$

enquanto a velocidade hidrodinâmica  $u_y$  é zero. A fração molar  $C$  não varia entre as placas e é igual ao seu valor de equilíbrio  $C_0$ . Substituindo (7.16) em (3.2), o tensor de cisalhamento reduzido é obtido como

$$\Pi = \frac{C_0 \sqrt{m_1} + (1 - C_0) \sqrt{m_2}}{\sqrt{\pi m}}. \quad (7.18)$$

### 7.1.3 Regime de transição

Para resolver o problema no regime de transição, o método DSMC foi aplicado. Este método já foi devidamente explicado no capítulo 4 de modo que não se é mais necessário repetir aqui. Os valores da viscosidade  $\mu_0$  foram calculados no artigo [38] e são apresentados na Tabela 7.3.

Os cálculos foram realizados também para o modelo HS. Para este potencial a quantidade  $r_0$  é o diâmetro molecular, para a colisão entre as mesmas espécies, e é o diâmetro médio, para colisões entre espécies diferentes. Neste caso, o máximo parâmetro de impacto  $b_{M,\alpha\beta}$  é igual à unidade.

Como nos capítulos anteriores, 40.000 partículas modelo foram usadas, o número de células foi 400, o tempo de incremento  $\Delta t$  foi de 0,002. O ângulo de deflexão foi pré-calculado para 900 valores do parâmetro de impacto distribuídos na faixa de  $0 \leq b_{M,\alpha\beta} \leq 3$  e para 600 valores da energia cinética relativa. Tais parâmetros garantem um erro numérico inferior a 0,5 %.

Os cálculos foram realizados para dois valores de velocidade parede, a saber,  $U/v_0 = 0,2$  e 2. Para o primeiro valor, a contribuição dos termos não lineares na solução hidrodinâmica (7.12) foi inferior a 0,2%. No regime de moléculas livres, a expressão do tensor de cisalhamento (7.18) contém apenas o termo linear. Assim, o valor de  $U/v_0 = 0,2$  corresponde à solução linearizada com a precisão assumida no presente trabalho. Sob esta condição, o tensor de cisalhamento adimensional  $\Pi$  não é afetado pelo potencial nem no regime hidrodinâmico, consulte Eq. (7.12) sem os termos da ordem  $\xi^2$ , nem no limite de moléculas livres, veja eq. (7.18). Poderíamos esperar uma pequena influência do potencial no tensor de cisalhamento  $\Pi$  somente no regime de transição ( $\delta \sim 1$ ).

Para o segundo valor  $U/v_0 = 2$ , a contribuição dos termos não-lineares na solução hidrodinâmica (7.12) é cerca de 15%. Estes termos contém o índice de viscosidade  $\omega$  e o número de Prandtl  $Pr$  que são dependentes do potencial. Assim, a influência do potencial deve exceder o erro numérico nos regimes de transição e hidrodinâmico.

Os valores da fração molar de equilíbrio  $C_0$  considerados aqui são os mesmos usados na Ref. [38], ou seja, 0, 0,25, 0,5, 0,75, e 1. Seis valores do parâmetro de rarefação  $\delta$  foram considerados 0,01, 0,1, 1, 10, 20 e 40.



## 7.1.4 Resultados e discussões

### Tensor de cisalhamento

Os valores numéricos do tensor de cisalhamento adimensional  $\Pi$  para o potencial AI são apresentados nas tabelas 7.1 e 7.2.

Tabela 7.1: Tensor de cisalhamento adimensional  $\Pi$  para potencial AI vs parâmetro de rarefação  $\delta$ , fração molar de equilíbrio  $C_0$  e velocidade da parede  $U/v_0 = 0,2$ . <sup>a</sup> Eq.(7.18), <sup>b</sup> Eq.(7.12).

$\delta$	$\Pi$				
	$C_0 = 0$	$C_0 = 0,25$	$C_0 = 0,5$	$C_0 = 0,75$	$C_0 = 1$
0 <sup>a</sup>	0,5642	0,5314	0,5007	0,4823	0,5642
0,01	0,5575	0,5252	0,4953	0,4775	0,5585
0,1	0,5167	0,4883	0,4619	0,4466	0,5191
1	0,3365	0,3232	0,3110	0,3037	0,3382
10	0,08320	0,08216	0,08146	0,08087	0,08324
20	0,04531	0,04510	0,04487	0,04461	0,04540
40	0,02381	0,02370	0,02368	0,02364	0,02383
40 <sup>b</sup>	0,02379	0,02371	0,02364	0,02360	0,02379

Os valores de  $\Pi$  para  $\delta = 0$ , foram calculados a partir da equação (7.18) e aqueles na última linha foram calculados a partir da equação (7.12) substituindo  $\delta = 40$  e os valores de  $\sigma_p$ ,  $\zeta_T$ ,  $\omega$  e  $\text{Pr}$  apresentados na Tabela 7.3.

Uma comparação entre os dados numéricos de  $\Pi$  para  $\delta = 0,01$  com os de  $\delta = 0$  mostra que a diferença relativa é de cerca de 0,01, ou seja, tem a ordem de  $\delta$ . A diferença entre os dados de DSMC para  $\delta = 40$  e os calculados a partir da solução hidrodinâmica (7.12) não excede 0,2%, ou seja, estas duas soluções coincidem dentro da precisão numérica. Assim, os dados apresentados na Tabela 7.1 cobrem toda a gama da rarefação do gás.

Para indicar a influência do potencial em toda a gama do parâmetro de rarefação, a tabela 7.4 representa o desvio relativo do tensor de cisalhamento com base no modelo de HS,  $\Pi_{HS}$ , do com base no potencial AI,  $\Pi_{AI}$ .

Como era esperado, a diferença entre  $\Pi_{HS}$  e  $\Pi_{AI}$  para a menor velocidade

Tabela 7.2: Tensor de cisalhamento adimensional  $\Pi$  para potencial AI vs parâmetro de rarefação  $\delta$ , fração molar de equilíbrio  $C_0$  e velocidade da parede  $U/v_0 = 2$ . <sup>a</sup> Eq.(7.18). <sup>b</sup> Eq.(7.12).

$\delta$	$\Pi$				
	$C_0 = 0$	$C_0 = 0,25$	$C_0 = 0,5$	$C_0 = 0,75$	$C_0 = 1$
0 <sup>a</sup>	0,5642	0,5314	0,5007	0,4823	0,5642
0,01	0,5612	0,5286	0,4981	0,4791	0,5615
0,1	0,5319	0,5015	0,4726	0,4537	0,5315
1	0,3663	0,3499	0,3330	0,3199	0,3616
10	0,09777	0,09379	0,09092	0,08926	0,09551
20	0,05316	0,05083	0,04962	0,04909	0,05191
40	0,02766	0,02647	0,02593	0,02575	0,02704
40 <sup>b</sup>	0,02783	0,02646	0,02586	0,02511	0,02699

Tabela 7.3: Propriedades da mistura He-Ar para  $T=300$  K.

$C_0$	$\mu(\mu\text{Pa} \cdot \text{s})$		$\kappa(\text{W/K})$		Pr		$-k_T$		$\sigma_P^{-1}$	$\zeta_T^{-2}$		$\omega$
	HS <sup>3</sup>	AI <sup>4</sup>	HS <sup>5</sup>	AI <sup>d</sup>	HS	AI	HS <sup>e</sup>	AI <sup>6</sup>		HS	PR	
0	22,68	22,68	17,86	17,74	0,6607	0,6652	-	-	1,018	1,954	1,954	0,85
0,25	22,81	23,22	29,27	32,60	0,5232	0,4782	0,1026	0,0604	1,084	1,769	1,969	0,81
0,5	22,77	23,53	47,62	54,34	0,4523	0,4096	0,1693	0,0962	1,150	1,777	2,017	0,77
0,75	22,22	23,18	80,67	89,63	0,4408	0,4139	0,1692	0,0916	1,191	1,910	2,070	0,71
1	19,91	19,91	156,50	155,52	0,6607	0,6648	-	-	1,018	1,954	1,954	0,68

de parede  $U/v_0 = 0,2$  é dentro da incerteza numérica 0,5% para valores elevados do parâmetro de rarefação, ie  $\delta \geq 10$ , e para o seu valor pequeno  $\delta = 0,01$ . No regime de transição ( $\delta = 1$ ) a diferença entre  $\Pi_{HS}$  e  $\Pi_{AI}$  excede a incerteza numérica, mas ainda é pequena, ou seja, cerca de 1%. Quando a velocidade da parede é grande ( $U/v_0 = 2$ ), a diferença entre  $\Pi_{HS}$  e  $\Pi_{AI}$  atinge o seu máximo perto do regime hidrodinâmico ( $\delta = 10$ ). Ela é um pouco menor no regime hidrodinâmico ( $\delta = 40$ ). Diminuindo o parâmetro de rarefação  $\delta$  começando de 10 a diferença diminui e torna-se menor do que o erro computacional em  $\delta = 0,1$ .

A fim de determinar a incerteza da equação modelo de McCormack, uma comparação entre o tensor de cisalhamento  $\Pi_{MC}$  calculado na Ref. [97] com base neste modelo com  $\Pi_{AI}$  calculado para o potencial AI em  $U/v_0 = 0,2$  é

Tabela 7.4: Desvio relativo do tensor de cisalhamento  $\Pi$  de HS para o de potencial AI vs  $\delta$ ,  $C_0$  e  $U/v_0$ .

$\delta$	$(\Pi_{HS} - \Pi_{AI})/\Pi_{AI}$ (%)									
	$C_0 = 0$		$C_0 = 0,25$		$C_0 = 0,5$		$C_0 = 0,75$		$C_0 = 1$	
	$\frac{U}{v_0} = 0,2$	2	0,2	2	0,2	2	0,2	2	0,2	2
0,01	0,23	0,20	0,27	0,13	0,16	0,06	0,02	0,08	0,05	0,14
0,1	0,83	0,13	0,59	-0,08	0,45	-0,30	0,25	-0,37	0,37	0,21
1	1,1	-2,9	0,99	-3,0	0,71	-3,0	0,53	-2,3	0,62	-1,7
10	0,36	-5,7	0,41	-4,5	0,06	-3,7	0,17	-3,0	0,31	-3,5
20	0,46	-5,7	0,29	-3,7	0,16	-3,0	0,20	-2,4	0,26	-3,3
40	0,04	-5,4	0,08	-3,3	-0,08	-2,6	-0,04	-2,1	-0,04	-3,3

mostrada na Tabela 7.5.

Tabela 7.5: Desvio relativo do tensor de cisalhamento  $\Pi$  baseado no modelo de McCormack (MC), vide Ref. [97], do para potencial AI vs parâmetro de rarefação  $\delta$  e fração molar de equilíbrio  $C_0$  para  $U/v_0 = 0,2$ .

$\delta$	$(\Pi_{MC} - \Pi_{AI})/\Pi_{AI}$ (%)				
	$C_0 = 0$	0,25	0,5	0,75	1
0,01	0,32	0,34	0,32	0,25	0,14
0,1	1,1	1,1	1,1	0,99	0,62
1	0,68	0,77	0,74	0,69	0,18
10	-0,14	0,02	-0,21	-0,15	-0,19
20	0,15	0,02	-0,09	0,13	-0,04
40	-0,08	0,04	-0,17	-0,21	-0,17

De acordo com a Ref. [97], o tensor de cisalhamento  $\Pi_{MC}$  com base no modelo de McCormack não é sensível ao potencial intermolecular.

Como é esperado, os valores de  $\Pi_{MC}$  coincidem com  $\Pi_{AI}$  para parâmetro de rarefação elevado ( $\delta \geq 10$ ) e para o valor pequeno ( $\delta = 0,01$ ). No entanto, para  $\delta = 0,1$  e 1, a diferença entre  $\Pi_{MC}$  e  $\Pi_{AI}$  é cerca de 1%, ou seja, ultrapassa a precisão numérica. Isto que o modelo de McCormack dá uma incerteza de cerca de 1% nesse caso.

## Gradiente de velocidade

O perfil de velocidade para o problema em questão difere, apenas ligeiramente, de uma linha reta, enquanto o gradiente de velocidade adimensional no ponto médio ( $x = 0$ ), ou seja, a quantidade

$$\nu = \frac{H}{U} \frac{du_y}{dx} \Big|_{x=0}, \quad (7.19)$$

depende fortemente do parâmetro de rarefação. No limite hidrodinâmico ( $\delta \gg 1$ ) é obtido da Eq.(7.7) como

$$\nu = \left[ 1 - \xi^2 \frac{\omega \text{Pr}}{30} \left( 1 + 4 \frac{\sigma_p}{\delta} \right) + O(\xi^4) \right] \left( 1 + \frac{2\sigma_p}{\delta} \right)^{-1}. \quad (7.20)$$

Assim, quando o termo de ordem de  $\xi^2$  é negligenciado, o gradiente  $\nu$  não é afetado pelo potencial embora os valores numéricos de  $\nu$  para  $U/v_0 = 0,2$  são omitidos aqui. No entanto, para uma velocidade de parede elevada, o termo da ordem  $\xi^2$  contém  $\omega$  e  $\text{Pr}$ , que dependem do potencial.

Os valores de  $\nu$  com base no potencial AI são apresentados na Tabela 7.6 para  $U/v_0 = 2$ .

Tabela 7.6: Gradiente de velocidade  $\nu$  definido em (7.19) para potencial AI vs parâmetro de rarefação  $\delta$  e fração molar de equilíbrio  $C_0$  para  $U/v_0 = 2$ .  
<sup>a</sup> Eq.(7.20)

$\delta$	$\nu$				
	$C_0 = 0$	0,25	0,5	0,75	1
0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
0,01	0,048	0,049	0,048	0,050	0,041
0,1	0,173	0,174	0,173	0,175	0,172
1	0,486	0,481	0,475	0,468	0,494
10	0,819	0,813	0,810	0,811	0,826
20	0,873	0,878	0,876	0,879	0,880
40	0,904	0,916	0,916	0,917	0,914
40 <sup>a</sup>	0,880	0,900	0,906	0,907	0,895

Esta quantidade varia de zero à unidade através da variação do parâmetro de rarefação de zero até infinito. É fracamente afetada pela fração molar. Na

última linha da tabela 7.6, os valores de  $\nu$  calculados a partir da equação (7.20) são dados. Estes valores são poucos por cento menores do que os calculados numericamente. Assim, ao contrário do tensor de cisalhamento, a contribuição de ordem  $\xi^4$  para o gradiente  $\nu$  é significativa, em torno de 2%.

De modo a avaliar a influência do potencial no gradiente, o desvio relativo de  $\nu$  com base no modelo de HS para o baseado no potencial AI é dado na Tabela 7.7.

Tabela 7.7: Desvio relativo do gradiente de velocidade  $\nu$  do modelo de HS para o de potencial AI vs parâmetro de rarefação  $\delta$  e fração molar de equilíbrio  $C_0$  para  $U/v_0 = 2$ .

$\delta$	$(\nu_{HS} - \nu_{AI})/\nu_{AI}$ (%)				
	$C_0 = 0$	0,25	0,5	0,75	1
0,1	-4,0	-2,2	0,87	1,8	-3,4
1	3,4	2,7	2,8	3,2	1,7
10	2,4	2,3	1,7	1,2	1,5
20	2,3	1,6	1,6	1,2	1,5
40	2,3	1,4	1,5	1,3	1,2

Como era de esperar, para grandes valores da rarefação, vide equação (7.6) e (7.20), o desvio de  $\nu$  é duas vezes menor do que o desvio correspondente ao tensor de cisalhamento  $\Pi$  apresentados na Tabela 7.4. Para valores pequenos do parâmetro de rarefação, o desvio relativo aumenta drasticamente porque a quantidade  $\nu$  tende a zero no limite  $\delta \rightarrow 0$ .

## Temperatura

De acordo com a solução hidrodinâmica (7.8), o desvio da temperatura do seu valor de equilíbrio tem uma forma parabólica e atinge o seu máximo no ponto médio do intervalo ( $x = 0$ ). No regime de moléculas livres, ver Eq. (7.17), o desvio da temperatura é constante. Para o valor de velocidade de parede  $U/v_0 = 0,2$  o desvio de temperatura é pequeno e tem a ordem do erro numérico. Assim, os dados sobre o perfil de temperatura são dados apenas para o valor da velocidade  $U/v_0 = 2$ . Os perfis típicos são representados na

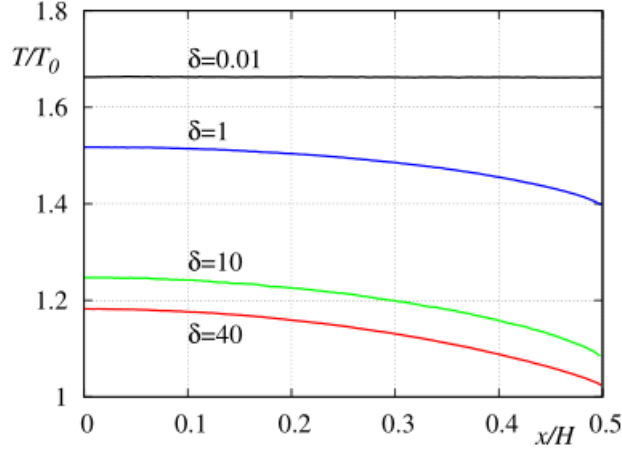


Figura 7.1: Perfil de temperatura para  $U/v_0 = 2$  e  $C_0 = 0,5$ . Publicado originalmente em [39].

Figura 7.1 variam suavemente desde a forma parabólica em  $\delta = 40$  para o perfil constante em  $\delta = 0,01$ .

Os valores da temperatura no ponto médio ( $x = 0$ ) são apresentados na Tabela 7.8 onde o valor molecular livre (7.17) e o limite hidrodinâmico (7.8) são também fornecidos.

Note, que em  $\delta = 0,01$  o valor de  $T(0)/T_0$  é praticamente o mesmo que o do regime de molécula livre. Os valores da temperatura em  $\delta = 40$  diferem ligeiramente da solução analítica (7.8), com o máximo de 0,7% em  $C_0 = 0,25$ .

A influência do potencial sobre a temperatura é apresentada na Tabela 7.9 sob a forma da diferença relativa entre a temperatura para o modelo de HS e potencial AI.

Tabela 7.8: Temperatura no ponto médio ( $x = 0$ ) para potencial AI vs parâmetro de rarefação  $\delta$  e fração molar de equilíbrio  $C_0$  para  $U/v_0 = 2$ . <sup>a</sup> Eq.(7.17). <sup>b</sup> Eq.(7.8).

$\delta$	$T(0)/T_0$				
	$C_0 = 0$	0,25	0,5	0,75	1
0 <sup>a</sup>	1,667	1,667	1,667	1,667	1,667
0,01	1,667	1,666	1,663	1,660	1,665
0,1	1,661	1,653	1,642	1,631	1,660
1	1,587	1,553	1,518	1,488	1,583
10	1,360	1,286	1,245	1,238	1,356
20	1,316	1,237	1,203	1,201	1,313
40	1,291	1,214	1,182	1,183	1,289
40 <sup>b</sup>	1,288	1,206	1,176	1,178	1,288

Tabela 7.9: Desvio relativo da temperatura no ponto médio ( $x = 0$ ) para HS daquele para potencial AI vs parâmetro de rarefação  $\delta$  e fração molar de equilíbrio  $C_0$  para  $U/v_0 = 2$ .

$\delta$	$(T_{HS} - T_{AI})/T_{AI}(\%)$				
	$C_0 = 0$	0,25	0,5	0,75	1
0,01	-0,06	-0,17	-0,12	-0,11	0,06
0,1	-0,24	-0,43	-0,55	-0,68	-0,18
1	-0,69	-1,10	-1,52	-1,73	-0,44
10	-0,74	-0,19	-0,02	-0,15	-0,44
20	-0,46	0,65	0,67	0,46	-0,23
40	-0,39	0,99	1,10	0,80	-0,23

Pode-se ver que na faixa de rarefação  $1 \leq \delta \leq 40$  a diferença relativa pode exceder 1% para alguns valores da fração molar  $C_0$ . De acordo com a solução hidrodinâmica (7.8), a diferença em relação a este regime é determinada pelo número de Prandtl que é maior para o modelo de HS do que para o potencial de AI. Ao diminuir o parâmetro de rarefação, a contribuição de salto de temperatura aumenta. Uma vez que o coeficiente de salto  $\zeta_\tau$  para AI é maior do que para o de HS, a temperatura para a AI torna-se maior do que aquela para o HS ao diminuir  $\delta$ . Para um gás único, isto é,  $C_0 = 0$  e 1, o número

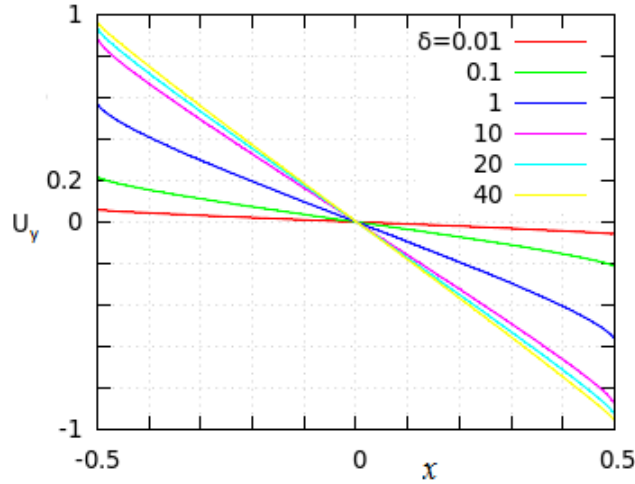


Figura 7.2: Perfis de velocidade para  $U/v_0 = 2$ ,  $C_0 = 0,5$  e vários  $\delta$ .

de Prandtl  $Pr$  é fracamente afetado pelo potencial, enquanto o coeficiente de salto  $\zeta_T$  é o mesmo para ambos os potenciais, de modo que a temperatura é praticamente a mesma para ambos.

### Perfil de Velocidade

Como sabemos, o perfil de velocidade para Couette é praticamente uma linha reta. Nas figura 7.2 mostramos os perfis de velocidade para potencial AI,  $U/v_0 = 2$ , concentrações  $C_0 = 0,5$  e parâmetro de rarefação  $\delta = 0,01, 0,1; 1, 10, 20$  e  $40$ . A velocidade é praticamente nula para o regime de moléculas livres, enquanto sofre grande variação para o regime hidrodinâmico, de modo que a inclinação do gráfico para este é maior.

### Fração molar

A fração molar na parede ( $x = H/2$ ), ou seja, no seu ponto de afastamento máximo, é dada na Tabela 7.10.

Seu valor limite no regime hidrodinâmico Eq. (7.11) dado na última linha difere dos resultados numéricos em  $\delta = 40$  por 0,1%. O desvio máximo da fração molar de seu valor de equilíbrio é observado em  $\delta = 10$ . A relação



Tabela 7.10: Fração molar  $C$  na parede ( $x = H/2$ ) para o potencial AI vs parâmetro de rarefação  $\delta$  e fração molar de equilíbrio  $C_0$  para  $U/v_0 = 2$ . <sup>a</sup> Eq.(7.11).

$\delta$	$C(H/2)$		
	$C_0 = 0,25$	0,5	0,75
0	0,2500	0,5000	0,7500
0,01	0,2498	0,4997	0,7496
0,1	0,2484	0,4979	0,7485
1	0,2424	0,4896	0,7419
10	0,2403	0,4872	0,7397
20	0,2418	0,4895	0,7405
40	0,2428	0,4900	0,7407
40 <sup>a</sup>	0,2431	0,4906	0,7410

(7.11) prevê que o desvio da fração molar de seu valor de equilíbrio é proporcional ao coeficiente de razão de termodifusão  $k_T$  que é significativamente afetado pelo potencial. Uma vez que a magnitude  $k_T$  de HS é maior do que para o potencial AI, o desvio de  $C(H/2)$  de  $C_0$  para o modelo de HS é maior do que o indicado na Tabela 7.10 para o potencial AI.

Entretanto, o valor da fração molar na parede  $C(H/2)$  é ligeiramente menor para o potencial de HS em comparação com o potencial AI.

A diferença de  $C(H/2)$  para os dois potenciais atinge 2% para os valores elevados do parâmetro de rarefação ( $\delta \geq 10$ ). Para parâmetro de rarefação pequeno  $\delta \leq 1$ , a diferença de  $C(H/2)$  para HS e AI não excede a precisão numérica.

Uma distribuição típica de fração molar é mostrada na Figura 7.3.

Uma vez que o coeficiente de razão de termodifusão  $k_T$  é negativo, o gradiente de fração molar tem o mesmo sinal que a temperatura. É curioso que os perfis de  $C(x)$  são praticamente os mesmos nos regimes de transição e hidrodinâmico, ou seja, na faixa de  $1 \leq \delta \leq 40$ . Perto do regime molécula livre ( $\delta = 0,01$ ), o perfil de  $C(x)$  é praticamente constante, ou seja,  $C(x) = C_0$ .

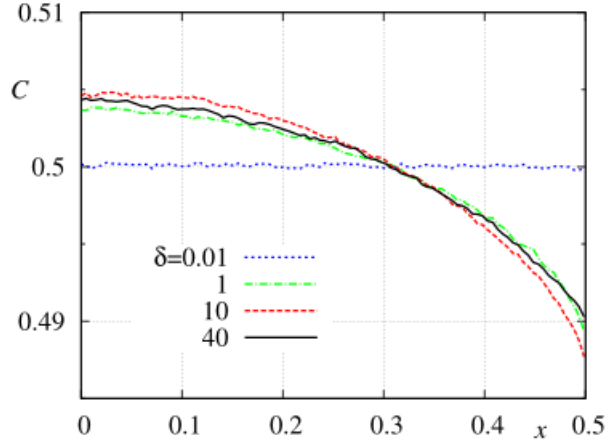


Figura 7.3: Perfil de fração molar para  $U/v_0 = 2$  e  $C_0 = 0,5$ . Publicado originalmente em [39].

## 7.2 Fluxo de calor entre duas placas paralelas

Transferência Plana de Calor é um problema similar ao do escoamento plano de Couette. Agora porém ambas as placas estão em repouso e uma delas é mantida a uma temperatura  $T_0 + \Delta T/2$  e a outra a uma temperatura  $T_0 - \Delta T/2$ . Devido à essa diferença de temperatura, surge um fluxo de calor da placa que está em maior temperatura para a placa que está em menor temperatura.

Aqui é calculado  $q$ , em função dos parâmetros  $\Delta T/T_0$ , da fração molar de equilíbrio  $C_0$  Eq. 2.4 e do parâmetro de rarefação  $\delta$  Eq. 2.6 para ambos os potenciais HS e AI com erro numérico de menos de 0,5%. Além disso, os perfis de temperatura e fração molar foram relatados. A comparação dos resultados com base nesses dois potenciais diferentes nos permite estudar a influência destes potenciais sobre a transferência de calor através de uma mistura.

Tabela 7.11: Índice de viscosidade  $\omega$  vs temperatura baseado nos dados de [54].

$T_1$ (K)	$T_2$ (K)	$\omega$				
		He	Ne	Ar	Kr	Xe
100,00	150,00	0,66	0,78	1,00	0,92	0,86
273,15	293,15	0,68	0,67	0,85	0,95	1,02
723,15	773,15	0,71	0,66	0,70	0,74	0,79
1173,15	1283,15	0,72	0,67	0,66	0,68	0,71
2723,15	3273,15	0,75	0,70	0,67	0,67	0,66

### 7.2.1 Limite hidrodinâmico

No regime hidrodinâmico ( $\delta \gg 1$ ), a solução baseia-se na equação de Fourier 2.24. Com a lei de Fourier e tendo em mente a conservação de energia, temos que o gradiente de  $q$  é nulo e a equação para a distribuição de temperatura é obtida como

$$\frac{d}{dx} \left( \kappa \frac{dT}{dx} \right) = 0. \quad (7.21)$$

A principal dificuldade para resolver esta equação é que o coeficiente  $\kappa$  é uma função tanto da temperatura  $T$  como da composição química  $C$  da mistura. O fato é que, em uma mistura não-isotérmica em repouso, um gradiente de fração molar é estabelecido que é também uma função da temperatura e fração molar locais. Assim, a distribuição da fração molar não é conhecida *a priori*, o que torna impossível uma solução analítica rigorosa da Eq.(7.21) para mistura.

A contribuição dos termos não-lineares para o fluxo de calor e temperatura pode ser estimada para um único gás. Aqui vamos nos restringir também a uma aproximação assumindo que a dependência da condutividade térmica  $\kappa$  com a temperatura seja dada por Eq.(7.1). Então, a equação (7.21) é facilmente resolvida como

$$T/T_0 = (A + Bx)^{1/(\omega+1)}. \quad (7.22)$$

Combinando as equações. (2.24) e (7.22), o fluxo de calor é obtido como

$$q'_x = -\kappa_0 B. \quad (7.23)$$

As constantes desconhecidas  $A$  e  $B$  são encontradas para a condição de continuidade da temperatura, ou seja,

$$T = T_0 \pm \Delta T/2, \quad \text{em } x = \pm H/2, \quad (7.24)$$

de modo que

$$A = \left[ (1 + \theta)^{\omega+1} + (1 - \theta)^{\omega+1} \right] / 2, \quad (7.25)$$

$$B = \left[ (1 + \theta)^{\omega+1} - (1 - \theta)^{\omega+1} \right] / H, \quad (7.26)$$

onde

$$\theta = \Delta T / 2T_0. \quad (7.27)$$

A fim de avaliar a contribuição dos termos não-lineares para a temperatura e fluxo de calor, os coeficientes  $A$  e  $B$  são expandidos com relação a  $\Delta T/T_0$  e substituídos nas equações (7.22) e (7.23), ou seja,

$$\frac{T}{T_0} = 1 + \frac{x}{H} \left( \frac{\Delta T}{T_0} \right) + \frac{\omega}{8} \left[ 1 - \left( \frac{2x}{H} \right)^2 \right] \left( \frac{\Delta T}{T_0} \right)^2 + O \left( \left( \frac{\Delta T}{T_0} \right)^3 \right), \quad (7.28)$$

$$q = \frac{5}{4\delta \text{Pr}} \left[ 1 - \frac{\omega(1-\omega)}{24} \left( \frac{\Delta T}{T_0} \right)^2 + O \left( \left( \frac{\Delta T}{T_0} \right)^4 \right) \right], \quad (7.29)$$

onde o fluxo de calor  $q$  adimensional definido pela equação (3.1) foi utilizado,  $\text{Pr} = c_p \mu_0 / \kappa_0$  é o número de Prandtl, e  $c_p = 5k_B/2m$  é o calor específico à pressão constante.

No caso da pequena diferença de temperatura ( $\Delta T/T_0 \ll 1$ ), a solução analítica do problema em questão foi obtida anteriormente [77] para a condição de contorno de salto de temperatura [159, 165]. Na nossa notação, a solução se lê

$$\frac{T}{T_0} = 1 + \frac{x}{H(1 + 2\zeta_T/\delta)} \frac{\Delta T}{T_0}, \quad (7.30)$$

$$q = \frac{5}{4(\delta + 2\zeta_T)\text{Pr}}, \quad (7.31)$$

onde  $\zeta_T$  é o coeficiente de salto de temperatura.

Os valores de  $\text{Pr}$  com base em ambos os potenciais HS e AI dados na Tabela 7.3 para a mistura em consideração mostram que este parâmetro é sensível à composição química e ao potencial intermolecular. O coeficiente de salto  $\zeta_T$  obtido em [159,165] tanto para potencial de HS e potencial realístico (PR) e apresentado na Tabela 7.3, também é fortemente afetado pelo potencial. Isso significa que, mesmo para a pequena diferença de temperatura  $\Delta T/T_0$ , o fluxo de calor dado pela Eq.(7.31) depende significativamente da composição química e é sensível ao potencial. A distribuição de temperatura dada por (7.30) é afetada pelo potencial apenas através do coeficiente de salto de temperatura, mas uma vez que a sua contribuição é pequena, a influência do potencial sobre a distribuição de temperatura é fraca. No caso de grande diferença de temperatura  $\Delta T/T_0$ , o fluxo de calor  $q$  dado por (7.29) e a distribuição de temperatura (7.28) são afetados pelo potencial também através do índice de viscosidade  $\omega$ . O valor calculado através dos dados empíricos [54] são apresentados na Tabela 7.3, enquanto o seu valor com base no potencial de HS é sempre igual a 0,5. Assim, a influência do potencial sobre o fluxo de calor é importante para qualquer diferença de temperatura e a mesma influência é esperada em uma gama ampla do parâmetro de rarefação que se estende desde o regime de transição ao hidrodinâmico.

### 7.2.2 Regime de molécula livre

No regime de molécula livre ( $\delta \rightarrow 0$ ), o problema é facilmente resolvido para reflexão difusa nas paredes, veja por exemplo Ref. [13], e também [77]. O fluxo de calor é dado por

$$q'_x = -\frac{4p_0v_0}{\sqrt{\pi}} \left[ C_0 \sqrt{\frac{m}{m_1}} + (1 - C_0) \sqrt{\frac{m}{m_2}} \right] \frac{\theta \sqrt{1 - \theta^2}}{\sqrt{1 + \theta} + \sqrt{1 - \theta}}, \quad (7.32)$$

onde  $m$  é a massa média definida por Eq.(2.3).

O fluxo de calor adimensional (3.1) toma a forma

$$q = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[ C_0 \sqrt{\frac{m}{m_1}} + (1 - C_0) \sqrt{\frac{m}{m_2}} \right] \frac{\sqrt{1 - \theta^2}}{\sqrt{1 + \theta} + \sqrt{1 - \theta}}. \quad (7.33)$$

A temperatura da mistura é dada como a média geométrica das temperaturas da superfície, isto é,

$$T = T_0 \sqrt{1 - \theta^2}. \quad (7.34)$$

A fração molar neste regime é igual ao seu valor de equilíbrio  $C_0$ .

De modo a estimar o desvio da solução não-linear (7.33) da linearizada, a expansão com respeito à diferença de temperatura é obtida como

$$q = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[ C_0 \sqrt{\frac{m}{m_1}} + (1 - C_0) \sqrt{\frac{m}{m_2}} \right] \times \left[ 1 - \frac{3}{32} \left( \frac{\Delta T}{T_0} \right)^2 + O \left( \left( \frac{\Delta T}{T_0} \right)^4 \right) \right], \quad (7.35)$$

$$\frac{T}{T_0} = 1 - \frac{1}{8} \left( \frac{\Delta T}{T_0} \right)^2 + O \left( \left( \frac{\Delta T}{T_0} \right)^4 \right). \quad (7.36)$$

### 7.2.3 Regime de transição

O método DSMC [13] baseado no potencial AI é aplicado. Aqui a mesma mistura, ou seja, He-Ar, é considerada, de modo que todos os dados sobre o potencial AI podem ser encontrados na Ref. [38].

Os cálculos foram realizados para o potencial HS também. Os diâmetros moleculares  $d_1$  e  $d_2$  necessários para este potencial foram extraídos a partir da expressão exata da viscosidade para um gás único de esferas rígidas Eq. 7.10. Foram utilizadas somente quantidades adimensionais com os seguintes dados de entrada: parâmetro de rarefação  $\delta$ , fração molar de equilíbrio  $C_0$ , diferença de temperatura relativa  $\Delta T/T_0$ . A viscosidade  $\mu_0$  usada para calcular o parâmetro de rarefação é dada na Tabela 7.3 tanto para HS como para potencial AI. O esquema numérico aplicado ao problema em questão é exatamente o mesmo que o utilizado na Ref. [39], ou seja, o número de

células foi de 400, o número de partículas modelo número foi  $4 \times 10^4$ , o incremento de tempo  $\Delta t = 0,002$  em unidades  $H/v_0$ . Os ângulos de deflexão foram pré-calculados para 900 valores do parâmetro de impacto distribuídos no intervalo de 0 a 3 unidades de distância  $d$  correspondentes ao zero do potencial e 600 valores da energia cinética relativa variando de 0 a  $600\epsilon$ , onde  $\epsilon$  é a profundidade do poço de potencial. Tais parâmetros fornecem o erro numérico inferior a 0,5%. A mesma matriz de ângulos de deflexão obtida uma vez para os cálculos apresentados anteriormente [38, 39] foi utilizada no presente trabalho. Esta é uma grande vantagem do método proposto na Ref. [37], permitindo aplicar a mesma tabela de consulta para fluxos de gases bem diferentes.

Dois valores de diferença de temperatura,  $\Delta T/T_0 = 0,2$  e  $1,5$  correspondendo às razões de temperatura

$$\frac{T_0 + \Delta T/2T_0}{T_0 - \Delta T/2T_0}, \quad (7.37)$$

de 1,22 e 7, respectivamente, foram escolhidos para os cálculos. Para o primeiro valor da diferença de temperatura ( $\Delta T/T_0 = 0,2$ ), as contribuições dos termos não-lineares para o fluxo de calor nos regimes hidrodinâmico (7.29) e de moléculas livres (7.35) são de cerca de 0,04% e 0,38%, respectivamente. A influência do termo quadrático  $(\Delta T/T_0)^2$  na temperatura, veja equações (7.36) e (7.28), não excede 0,5%. Assim, os resultados para a diferença de temperatura  $\Delta T/T_0 = 0,2$  correspondem à solução linear dentro da precisão de 0,5% assumida no presente trabalho. Para o segundo valor da diferença de temperatura ( $\Delta T/T_0 = 1,5$ ), um desvio em relação à solução linearizada é esperado. Aqui, os mesmos valores da fração molar de equilíbrio  $C_0$  foram utilizados e o parâmetro de rarefação  $\delta$  utilizado foi 1, 10, 20, e 40.

No problema em questão, o fluxo de calor  $q'_x$  é calculado através da energia cinética  $E$  das partículas que atravessam uma área  $A$  durante o tempo  $t$ , ou seja,  $q'_x = E/At$ . Nas simulações, o fluxo de calor foi calculado através do plano que fica no meio ( $x = 0$ ), isto é, as energias cinéticas de todas as partículas que atravessam o plano médio foram somadas com um sinal

dependendo da direção de movimento e, em seguida, dividido pelo tempo total  $t$  da simulação. A fim de reduzir a dispersão estatística relativa do fluxo de calor até um valor significativamente menor do que a incerteza adotada 0,5%, o tempo de simulação  $t$  foi  $5 \times 10^4$  e  $10^4$  em unidades de  $H/v_0$  para  $\Delta T/T_0 = 0,2$  e  $1,5$ , respectivamente. A temperatura local  $T$  da mistura é calculada através da sua definição, ou seja, a energia cinética média de todas as partículas em cada célula deve ser igual a  $(3/2)k_B T$ . Durante a simulação, foi feita a média da energia cinética sobre todas as partículas e ao longo de todo o tempo da simulação. A fração molar local  $C$  foi calculada como  $C = N_1/(N_1 + N_2)$ , onde  $N_i$  é o número de partículas da espécie  $i$  em cada célula.

## 7.2.4 Resultados e discussões

### Fluxo de calor

Os valores numéricos do fluxo de calor adimensional  $q$  para o potencial AI são apresentados nas tabelas 7.12, 7.13 .

Tabela 7.12: Fluxo de calor adimensional  $q$  para potencial AI vs parâmetro de rarefação  $\delta$ , fração molar de equilíbrio  $C_0$  e diferença de temperatura  $\Delta T/T_0 = 0,2$ . <sup>a</sup> Eq.(7.33), <sup>b</sup> Eq.(7.31).

$\delta$	$q$				
	$C_0 = 0$	$C_0 = 0,25$	$C_0 = 0,5$	$C_0 = 0,75$	$C_0 = 1$
0 <sup>a</sup>	0,5621	0,7619	0,8669	0,8395	0,5621
0,01	0,5577	0,7570	0,8617	0,8345	0,5580
0,1	0,5294	0,7230	0,8254	0,7996	0,5321
1	0,3971	0,5495	0,6318	0,6139	0,4013
10	0,1347	0,1870	0,2175	0,2135	0,1357
20	0,07843	0,1088	0,1267	0,1248	0,07874
40	0,04266	0,05930	0,06926	0,06829	0,04284
40 <sup>b</sup>	0,04280	0,05949	0,06930	0,06842	0,04282



Tabela 7.13: Fluxo de calor adimensional  $q$  para potencial AI vs parâmetro de rarefação  $\delta$ , fração molar de equilíbrio  $C_0$  e diferença de temperatura  $\Delta T/T_0 = 1,5$ . <sup>a</sup> Eq.(7.33).

$\delta$	$q$				
	$C_0 = 0$	$C_0 = 0,25$	$C_0 = 0,5$	$C_0 = 0,75$	$C_0 = 1$
0 <sup>a</sup>	0,4094	0,5550	0,6315	0,6115	0,4094
0,01	0,4076	0,5527	0,6291	0,6095	0,4080
0,1	0,3913	0,5308	0,6051	0,5878	0,3941
1	0,3046	0,4145	0,4764	0,4663	0,3094
10	0,1220	0,1699	0,1988	0,1962	0,1233
20	0,07355	0,1038	0,1222	0,1206	0,07441
40	0,04083	0,05799	0,06849	0,06774	0,04129

Os valores de  $q$  no regime de molécula livre ( $\delta = 0$ ) foram calculados a partir da equação (7.33) e aqueles na última linha, foram calculados a partir da equação (7.31) substituindo  $\delta=40$  e os valores de  $\text{Pr}$  e  $\zeta_T$  apresentados na Tabela 7.3 para AI e PR. A comparação dos dados numéricos de  $q$  para  $\delta=0,01$  com os de  $\delta=0$  mostra que a diferença relativa não excede 1%, ou seja, tem a ordem do parâmetro de rarefação  $\delta$ . A diferença entre os dados de DSMC para  $\delta = 40$  e  $\Delta T/T_0 = 0,2$  das calculadas a partir da equação linearizada de Fourier (7.31) é inferior a 0,3%, ou seja, a discrepância entre os resultados numéricos e solução analítica não excede o erro numérico.

A tabela 7.14 apresenta o desvio relativo do fluxo de calor  $q$  do potencial de HS para o potencial AI.

Como esperado, a diferença entre os dados de mistura baseados nestes dois potenciais é significativa no regime hidrodinâmico ( $\delta \gg 1$ ) e atinge 8%. Ao mesmo tempo, os dados de gás único ( $C_0 = 0$  e 1) não diferem significativamente. Isso se explica pelo fato do número de Prandtl para uma mistura, ver Tabela 7.3, ser bastante sensível ao potencial, embora não seja afetado pelo potencial no caso de gás único. A diferença relativa entre os valores correspondentes aos diferentes potenciais diminui ao diminuirmos o parâmetro de rarefação, quando as colisões intermoleculares desaparecem.

Tabela 7.14: Desvio relativo do fluxo de calor  $q$  para HS do para potencial AI vs parâmetro de rarefação  $\delta$ , fração molar de equilíbrio  $C_0$  e diferença de temperatura  $\Delta T/T_0$ .

$\delta$	$(q_{HS} - q_{AI})/q_{AI}$ (%)									
	$C_0 = 0$		$C_0 = 0,25$		$C_0 = 0,5$		$C_0 = 0,75$		$C_0 = 1$	
	$\frac{\Delta T}{T_0} = 0,2$	1,5	0,2	1,5	0,2	1,5	0,2	1,5	0,2	1,5
0,01	0,21	0,28	0,10	0,20	0,11	0,16	0,10	0,45	0,16	0,20
0,1	0,92	1,4	0,35	1,0	0,20	0,90	0,30	0,83	0,41	0,68
1	2,1	3,3	-0,50	1,7	-0,79	1,5	-0,05	1,8	1,0	1,7
10	1,7	2,0	-5,3	-2,6	-6,1	-2,7	-3,5	-0,31	0,95	0,90
20	1,2	1,7	-6,7	-4,2	-7,4	-4,4	-4,4	-1,2	0,82	0,48
40	1,2	1,6	-7,4	-5,3	-8,1	-5,3	-5,0	-1,6	0,80	0,41

A fim de determinar a incerteza da equação modelo de McCormack [49] aplicada à transferência de calor, uma comparação entre o fluxo de calor calculado na Ref. [77] baseado neste modelo com aquele aqui calculado para o potencial de AI para  $\Delta T/T_0 = 0,2$  é mostrada na Tabela 7.15.

Tabela 7.15: Desvio do modelo de McCormack (MC) para PR, veja Ref. [77], daquele para potencial AI vs parâmetro de rarefação  $\delta$ , fração molar de equilíbrio  $C_0$  para  $\Delta T/T_0 = 0,2$ .

$\delta$	$(q_{MC} - q_{AI})/q_{AI}$ (%)				
	$C_0 = 0$	0,25	0,5	0,75	1
0,01	0,55	0,47	0,44	0,44	0,49
0,1	1,1	0,60	0,42	0,43	0,57
1	0,76	-0,63	-1,0	-0,91	-0,28
10	0,08	-1,8	-2,4	-1,9	-0,62
20	-0,03	-1,8	-2,2	-1,7	-0,42
40	0,08	-1,9	-2,4	-1,8	-0,35

Note que de acordo com a Ref. [77], o fluxo de calor com base no modelo de McCormack é afetado pelo potencial intermolecular, de modo que os dados apresentados na Tabela 7.15 foram obtidos a partir deste modelo com o potencial realístico (PR). Como esperado, a diferença está praticamente dentro da incerteza numérica no caso de gás único, isto é,  $C_0 = 0$  e 1. No entanto, para mistura, a diferença entre os dados obtidos a partir da equação modelo

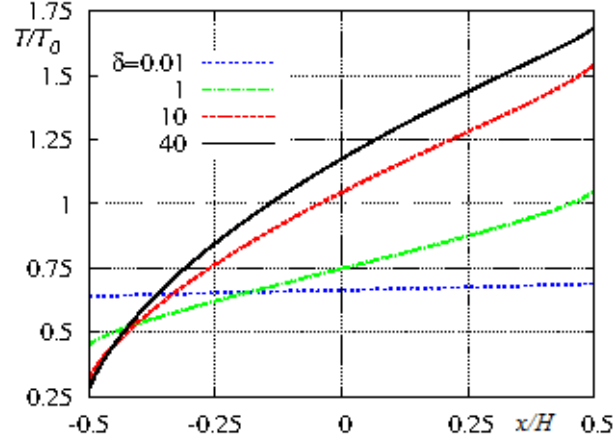


Figura 7.4: Temperatura  $T/T_0$  vs coordenada  $x$  para o potencial AI em  $\Delta T/T_0 = 1,5$ ,  $C_0 = 0,5$ . Publicado originalmente em [40].

e os baseados no método DSMC excede o erro numérico e atinge 2,4%. Essa discrepância é explicada pelo fato de que a equação de McCormack reproduz os coeficientes de transporte apenas em seu primeiro termo da expansão Sonine [3], enquanto os outros termos da expansão modificam a condutividade térmica dentro de alguns pontos percentuais. Vale a pena notar que os esforços computacionais para resolver a equação cinética modelo são muito menores do que aqueles para aplicar o método da DSMC de modo que o modelo de McCormack pode fornecer resultados confiáveis sobre a transferência de calor dentro da incerteza de 2% com esforço computacional modesto.

## Distribuição de temperatura

Para o valor pequeno da diferença de temperatura ( $\Delta T/T_0 = 0,2$ ), o perfil da temperatura  $T(x)$  é muito próximo de uma linha reta e sempre satisfaz a condição  $T(0) = T_0$ . Sua inclinação varia suavemente de zero no regime de molécula livre, ver Eq. (7.36), ao valor  $dT/dx = \Delta T/H$  no regime hidrodinâmico de acordo com a equação (7.28). O perfil de temperatura para grande valor de diferença de temperatura  $\Delta T/T = 1,5$  é mais interessante e vale a pena analisá-lo em detalhes.

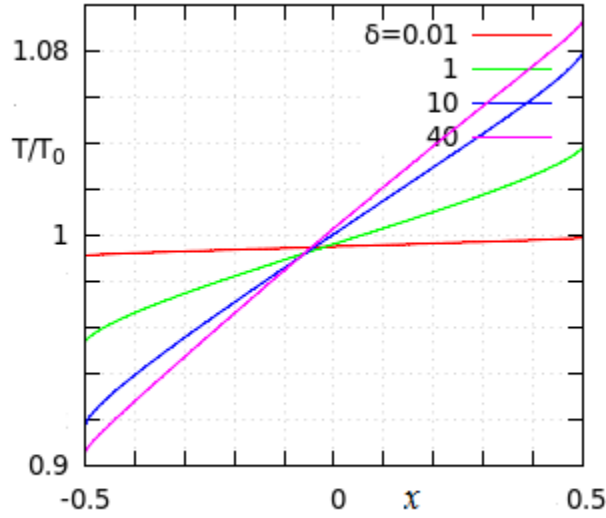


Figura 7.5: Temperatura  $T/T_0$  vs coordenada  $x$  para potencial AI em  $\Delta T/T_0 = 0,2$ ,  $C_0 = 0,5$ .

Perfis de temperatura típicos  $T(x)$  para  $\Delta T/T_0 = 1,5$  e  $C_0 = 0,5$  são mostrados na Figura 7.4. Como pode ser visto, neste caso, os perfis são diferentes de uma linha reta. Eles também não são simétricos em torno de  $T_0$ . No limite hidrodinâmico ( $\delta = 40$ ) a temperatura  $T$  varia suavemente entre o valor ligeiramente mais elevado do que da placa à esquerda, isto é,  $T/T_0 = 0,25$ , para o valor um pouco mais baixo do que a da placa direita, ou seja,  $T/T_0 = 1,75$ . No regime de molécula livre ( $\delta = 0,01$ ), o perfil de temperatura tende a seu valor constante dado pela Eq. (7.34), ou seja,  $T/T_0 = 0,661$ . Assim, na transição do regime hidrodinâmico para o de molécula livre, o gradiente de temperatura diminui e desaparece.

Os valores da temperatura perto das superfícies, ou seja, em  $x = \pm H/2$ , com base no potencial AI são apresentados na Tabela 7.16 para a diferença de temperatura  $\Delta T/T_0 = 1,5$ .

Estes dados mostram que a temperatura é ligeiramente afetada pela composição química da mistura. Uma análise dos dados numéricos para o potencial de HS mostra que a distribuição de temperatura também é fracamente

Tabela 7.16: Temperatura  $T/T_0$  nas paredes ( $x = \pm H/2$ ) para potencial AI vs fração molar de equilíbrio  $C_0$  e parâmetro de rarefação  $\delta$  para  $\Delta T/T_0 = 1,5$ .  
<sup>a</sup> Eq.(7.34). <sup>b</sup> Eq.(7.24)

$\delta$	$T/T_0$									
	$C_0 = 0$		0,25		0,5		0,75		1	
	$x = -\frac{H}{2}$	$\frac{H}{2}$	$-\frac{H}{2}$	$\frac{H}{2}$	$-\frac{H}{2}$	$\frac{H}{2}$	$-\frac{H}{2}$	$\frac{H}{2}$	$-\frac{H}{2}$	$\frac{H}{2}$
0. <sup>a</sup>	0,661	0,661	0,661	0,661	0,661	0,661	0,661	0,661	0,661	0,661
0,01	0,656	0,669	0,657	0,669	0,639	0,689	0,657	0,668	0,657	0,668
0,1	0,571	0,788	0,575	0,781	0,579	0,774	0,583	0,768	0,584	0,774
1	0,442	1,09	0,446	1,07	0,451	1,05	0,456	1,04	0,458	1,07
10	0,320	1,55	0,322	1,55	0,324	1,55	0,326	1,54	0,324	1,54
20	0,297	1,64	0,298	1,64	0,300	1,63	0,301	1,63	0,298	1,63
40	0,280	1,69	0,282	1,69	0,283	1,69	0,283	1,68	0,280	1,68
40 <sup>b</sup>	0,250	1,75	0,250	1,75	0,250	1,75	0,250	1,75	0,250	1,75

afetada pelo potencial molecular mesmo para o grande valor de diferença de temperatura.

## Fração molar

A fração molar em uma mistura não-isotérmica não é uniforme por causa do fenômeno de termodifusão. Distribuições de frações molares típicas para o valor maior de diferença de temperatura  $\Delta T/T_0 = 1,5$  são mostrados nas Figuras 7.6, 7.7, 7.8.

Uma vez que a taxa de difusão térmica  $k_T$  é negativa, o gradiente de fração molar tem o mesmo sinal que o da temperatura. Fisicamente, isso significa que a fração molar de espécies gasosas leves é maior perto da parede mais quente do que perto da mais fria. O gradiente de fração molar desaparece ao diminuir o parâmetro de rarefação  $\delta$ . Os valores numéricos da fração molar perto das superfícies ( $x = \pm H/2$ ) são apresentados na Tabela 7.17 em função do parâmetro de rarefação  $\delta$  e da fração molar de equilíbrio  $C_0$ .

Para todos os valores de  $C_0$ , o desvio de  $C(\pm H/2)$  a partir de  $C_0$  aumenta com o aumento do parâmetro de rarefação  $\delta$  e tende a um valor constante no limite  $\delta \rightarrow \infty$ .

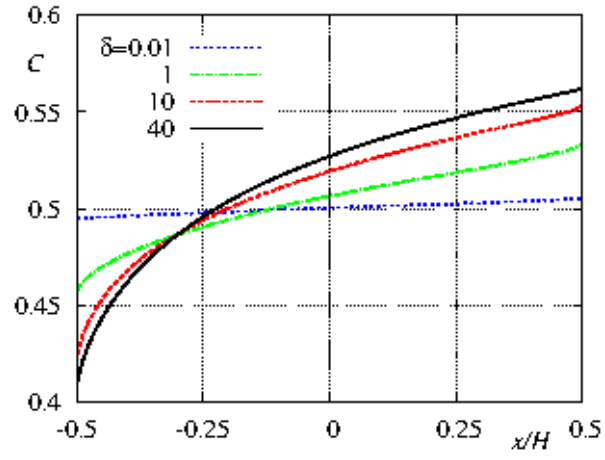


Figura 7.6: Fração molar  $C$  vs coordenada  $x$  para potencial AI para  $\Delta T/T_0 = 1,5$ ,  $C_0 = 0,5$ . Publicado originalmente em [40].

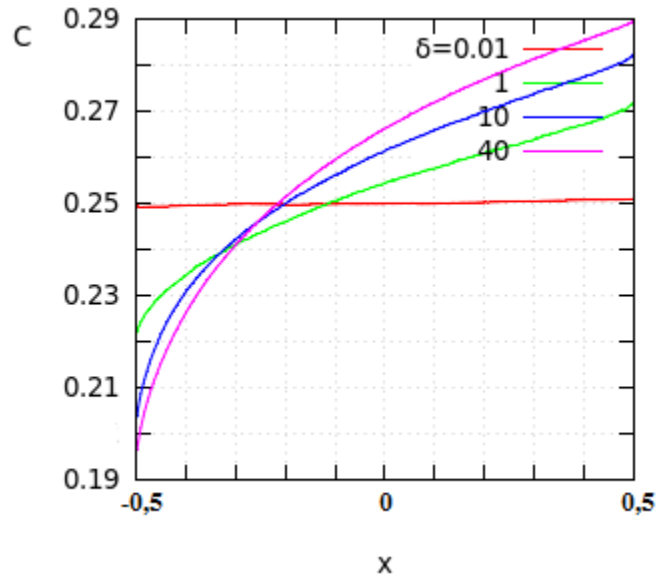


Figura 7.7: Fração molar  $C$  vs coordenada  $x$  para potencial AI para  $\Delta T/T_0 = 1,5$ ,  $C_0 = 0,25$ .

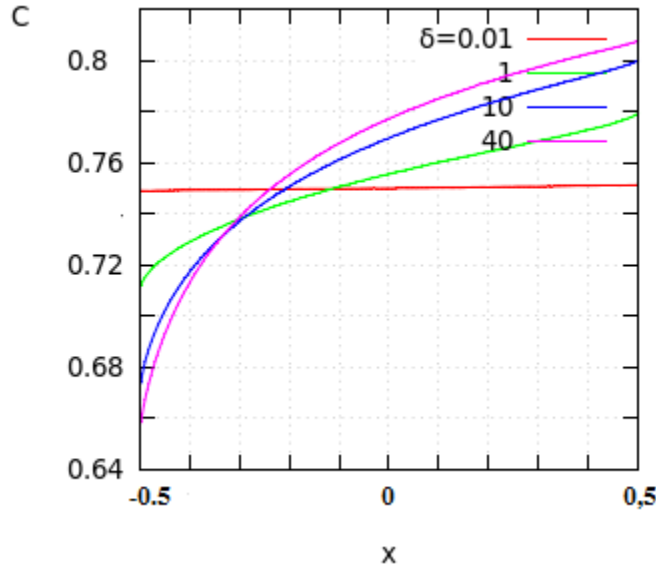


Figura 7.8: Fração molar  $C$  vs coordenada  $x$  para potencial AI para  $\Delta T/T_0 = 1,5$ ,  $C_0 = 0,75$ .

De acordo com os trabalhos [38,39], a difusão térmica  $k_T$  determinante da distribuição da fração molar é muito sensível ao potencial intermolecular, ver Tabela 7.3, de modo que a variação na composição química entre as placas é fortemente afetada pelo potencial. As Figuras de 7.9 até 7.14 mostram uma comparação da distribuição da fração molar  $C(x)$  para o potencial AI com aquela para o potencial de HS no caso  $\Delta T/T_0 = 1,5$ .

De acordo com a Tabela 7.3,  $k_T$  para HS é maior do que para o potencial AI, então o gradiente correspondente de  $C(x)$  para HS também é maior. Assim, se alguém está interessado em resultados confiáveis sobre a distribuição de espécies em uma mistura não isotérmica, um potencial de confiança, por exemplo, AI ou LJ, tem de ser usado em vez de HS.

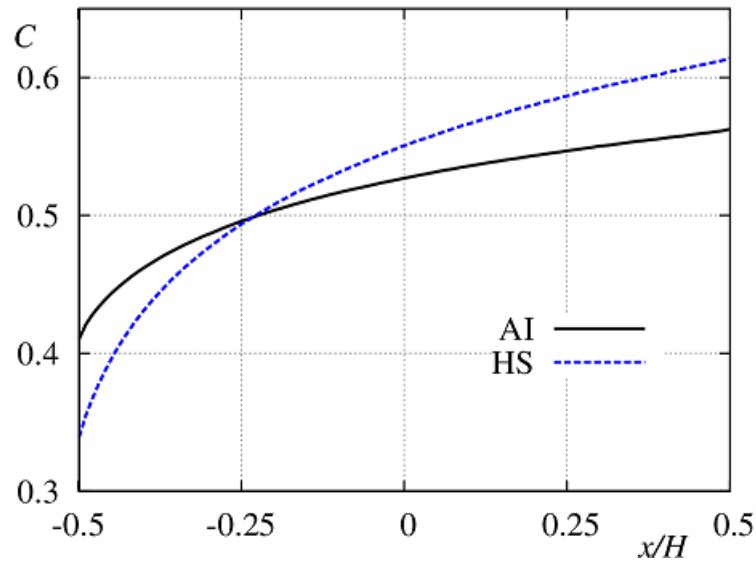


Figura 7.9: Fração molar  $C$  vs coordenada  $x$  para potenciais AI e HS para  $\Delta T/T_0 = 1,5$ ,  $C_0 = 0,5$  e  $\delta = 40$ . Publicado originalmente em [40].

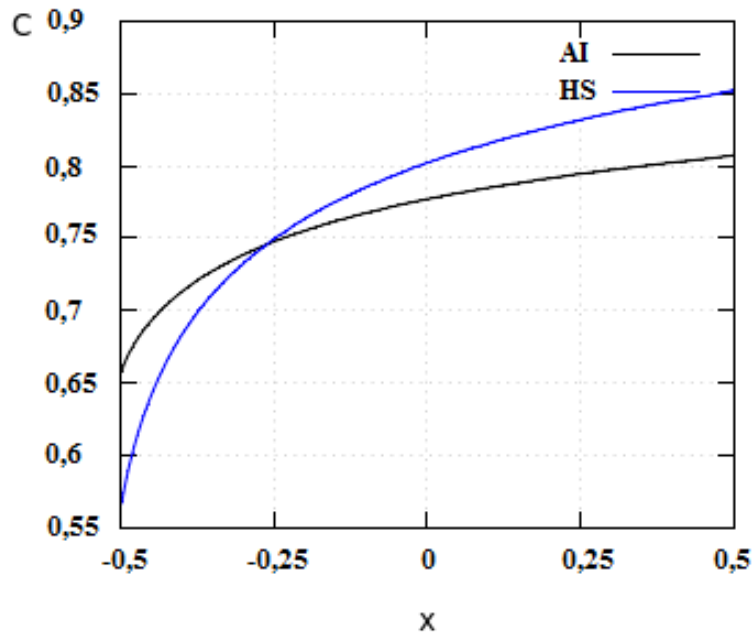


Figura 7.10: Fração molar  $C$  vs coordenada  $x$  para potenciais AI e HS para  $\Delta T/T_0 = 1,5$ ,  $C_0 = 0,75$  e  $\delta = 40$ .



Tabela 7.17: Fração molar  $C$  nas paredes ( $x = \pm H/2$ ) para potencial AI vs seu valor de equilíbrio  $C_0$  e parâmetro de rarefação  $\delta$  para  $\Delta T/T_0 = 1,5$ .

$\delta$	$C(\pm H/2)$					
	$C_0 = 0,25$		$C_0 = 0,5$		$C_0 = 0,75$	
	$x = -\frac{H}{2}$	$\frac{H}{2}$	$-\frac{H}{2}$	$\frac{H}{2}$	$-\frac{H}{2}$	$\frac{H}{2}$
0	0,25	0,25	0,50	0,50	0,75	0,75
0,01	0,249	0,251	0,495	0,505	0,749	0,751
0,1	0,238	0,260	0,482	0,515	0,734	0,763
1	0,220	0,271	0,457	0,533	0,712	0,779
10	0,204	0,283	0,424	0,553	0,674	0,800
20	0,199	0,287	0,415	0,559	0,664	0,805
40	0,197	0,290	0,410	0,563	0,659	0,808

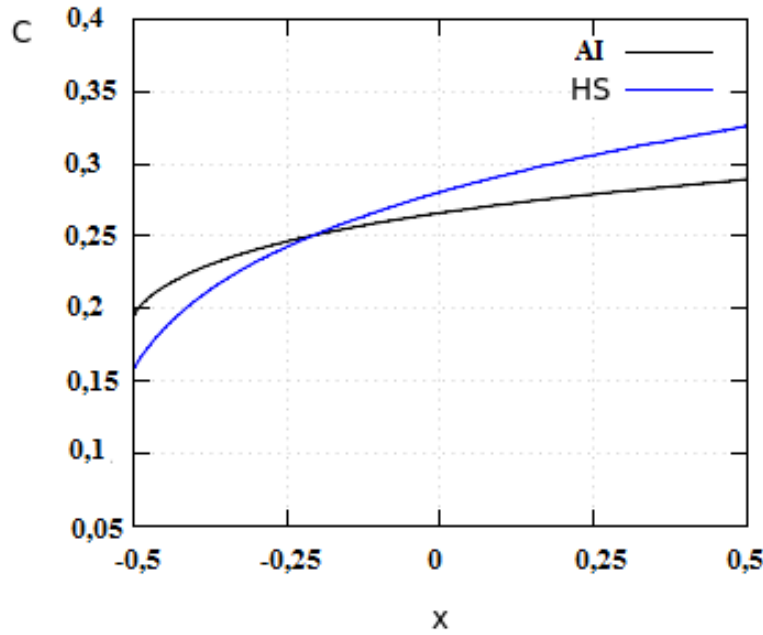


Figura 7.11: Fração molar  $C$  vs coordenada  $x$  para potenciais AI e HS para  $\Delta T/T_0 = 1,5$ ,  $C_0 = 0,25$  e  $\delta = 40$ .

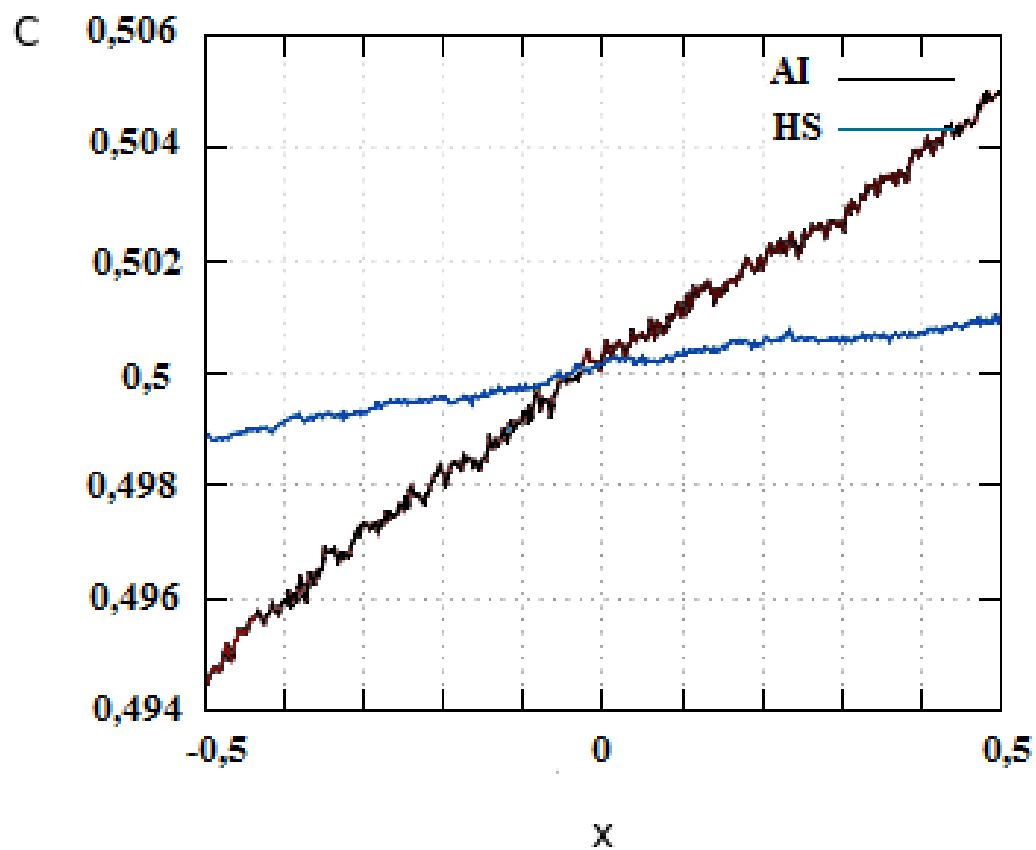


Figura 7.12: Fração molar  $C$  vs coordenada  $x$  para potenciais AI e HS para  $\Delta T/T_0 = 1,5$ ,  $C_0 = 0,5$  e  $\delta = 0,01$ .

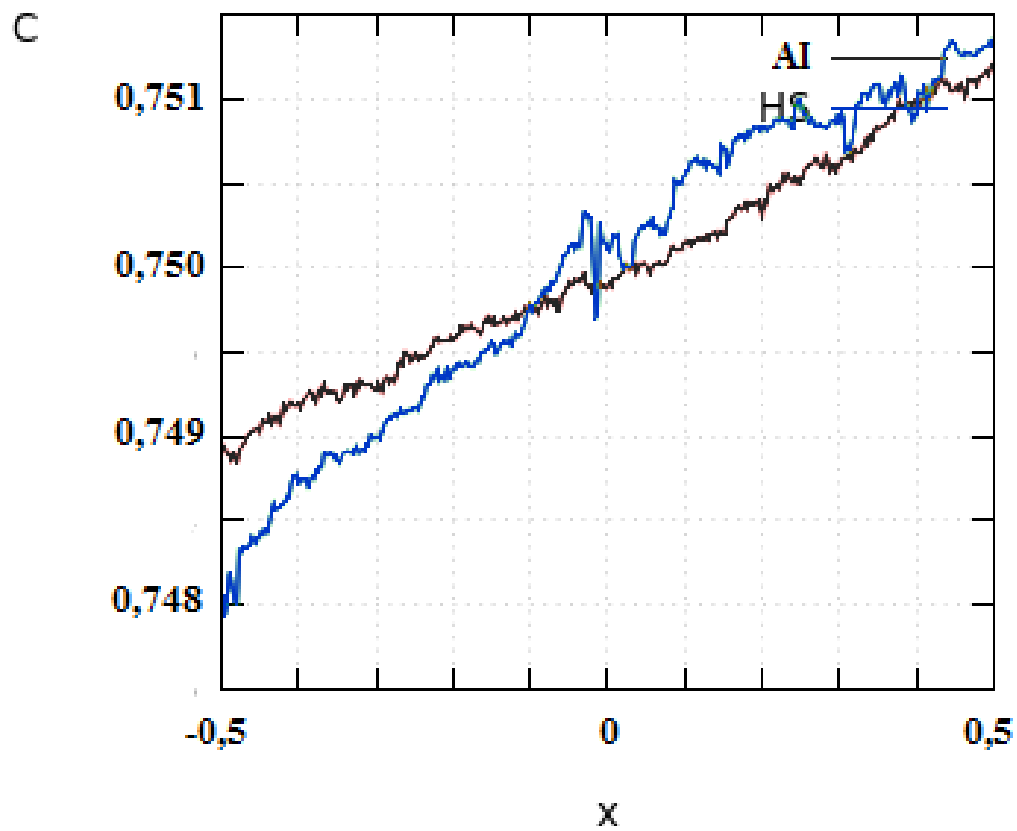


Figura 7.13: Fração molar  $C$  vs coordenada  $x$  para potenciais AI e HS para  $\Delta T/T_0 = 1,5$ ,  $C_0 = 0,75$  e  $\delta = 0,01$ .

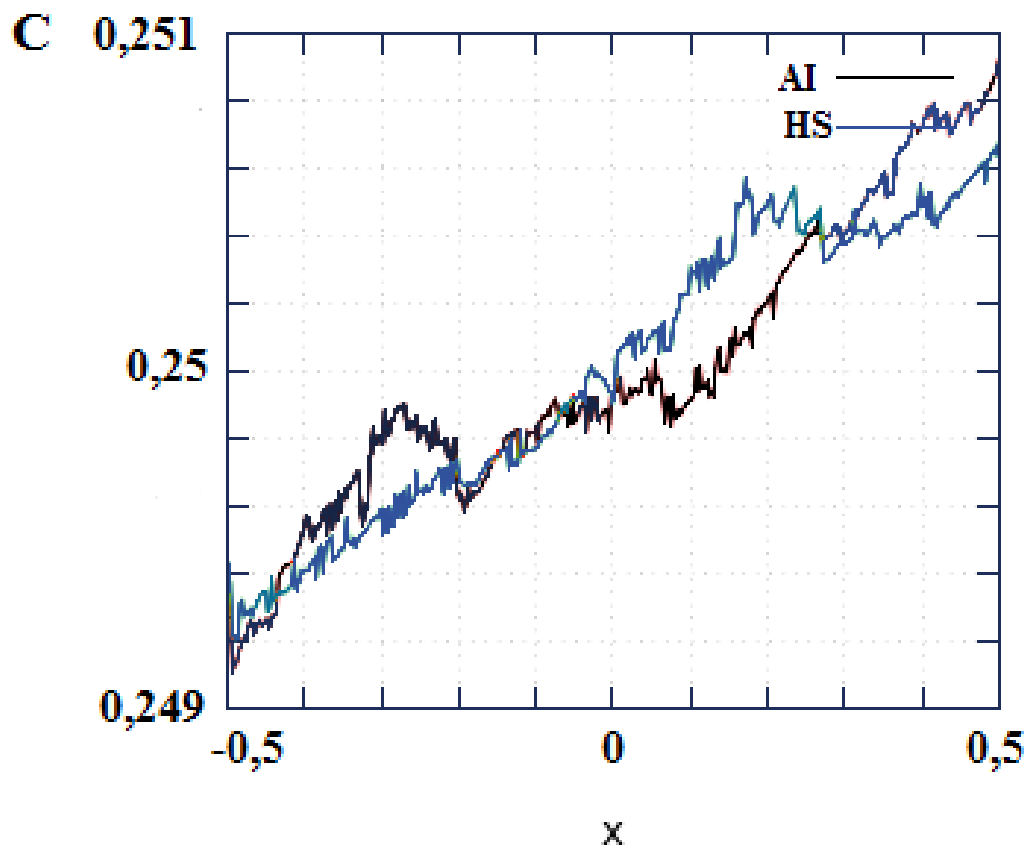


Figura 7.14: Fração molar  $C$  vs coordenada  $x$  para potenciais AI e HS para  $\Delta T/T_0 = 1,5$ ,  $C_0 = 0,25$  e  $\delta = 0,01$ .

## Capítulo 8

# Fluxo de gás rarefeito através de orifício

### 8.1 Parâmetros da simulação

A solução do escoamento através de orifício, vide Figura 3.3, é, em princípio, também determinada pela lei de interação gás-superfície. Como foi mostrado nas Refs. [125,167], a influência deste fator sobre as taxas para fenda e orifício é desprezível, de modo que a reflexão difusa de partículas gasosas nas paredes divisórias é assumida.

A origem do sistema de referência é fixada no centro do orifício de raio  $a$ , como é mostrado na Figura 8.1. Nesta figura o orifício (apenas a parte superior) é visto de lado. A linha mais escura corresponde à partição.

O domínio computacional se estende na região  $0 \leq r \leq R$  e  $-L \leq x \leq L$ , onde  $r = \sqrt{y^2 + z^2}$  é a coordenada radial. Os tamanhos  $R$  e  $L$  do domínio computacional são iguais a  $10a$ . A grade computacional axi-simétrica é estruturada com células não uniformes de três tamanhos diferentes, vide Figura 8.1. Esta malha de três níveis é necessária, a fim de capturar os íngremes gradientes macroscópicos perto da borda do orifício com um esforço computacional razoável. O tamanho das células maiores é  $a/20$  e das menores é de  $a/80$  e o número total de células é 84800.

Para proporcionar uma distribuição mais uniforme de partículas modelo

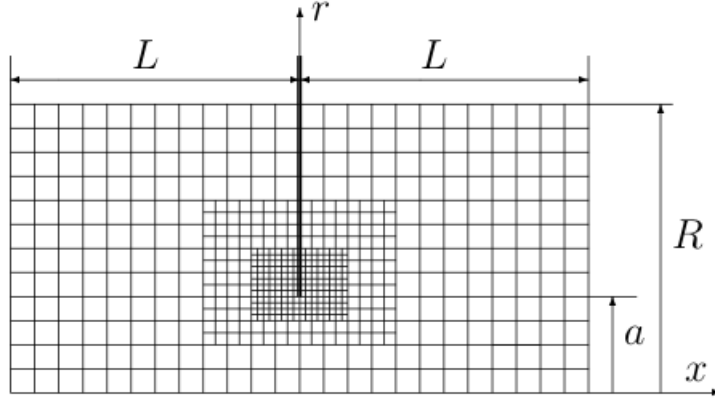


Figura 8.1: Grade numérica e coordenadas. Publicado originalmente em [41].

sobre o domínio computacional, dez zonas de ponderação radiais foram introduzidas. Além disso, várias zonas longitudinais de ponderação foram introduzidas. Os números de tais zonas variaram de dois a cinco, dependendo da relação de pressão  $p_1/p_0$ . Essas zonas equivalem a uma representação  $F_N$  diferente numa dada região, de modo a termos uma maior precisão numérica num determinado ponto de maior interesse, e também para reduzir a variação do número de partículas modelo por célula, devido à variação muito alta de densidade.

Em cada passo de tempo  $\Delta t$ , o número de pares a serem selecionados para colisões intermoleculares em cada célula é calculado como

$$N_{\text{coll}} = N_p(N_p - 1)F_N\sigma_t v_m \Delta t / (2V_c), \quad (8.1)$$

onde  $N_p$  é o número de moléculas na célula,  $F_n$  é o número de partículas gasosas reais representados por uma partícula modelo,  $v_m$  é a velocidade relativa máxima entre duas partículas,  $\sigma_t$  é a seção de choque total de colisão das partículas, e  $V_C$  é o volume da célula. Cada par selecionado é aceito para uma colisão se  $v/v_m > R_f$ , onde  $v$  é a sua velocidade relativa e  $R_f$  é um número aleatório que varia de 0 a 1. Note que na presente técnica, a seção

de choque total  $\sigma_t$  é constante.

Os cálculos em termos de quantidades adimensionais são mais vantajosos porque não requerem a especificação do raio  $a$  do orifício e da pressão do gás  $p_0$ , mas sim o parâmetro de rarefação (3.3) que é utilizado como um parâmetro de entrada. Assim, no presente trabalho, o raio  $a$  é usado como unidade de comprimento, a velocidade mais provável  $v_0$  é a unidade de velocidade e a razão  $a/v_0$  a unidade de tempo. A viscosidade adimensional também é apresentada de acordo com [64] como

$$\tilde{\mu} = \mu r_0^2 / m v_0. \quad (8.2)$$

Então a expressão (8.1) pode ser escrita na forma adimensional

$$N_{\text{coll}} = (N_p / N_{0p})(N_p - 1)(\sigma_t / r_0^2)(v_m \Delta t / a) \delta \tilde{\mu}, \quad (8.3)$$

onde  $N_{0p}$  é o número de partículas na célula correspondente ao estado de equilíbrio do gás. A quantidade  $r_0$  significa o ponto zero de  $U(r)$  para o potencial AI e o diâmetro molecular para o modelo de HS.

Como foi mostrado na Ref. [64], a viscosidade reduzida para o modelo de HS é dada pela constante  $\tilde{\mu} = 0,126668$ . Uma vez que a seção de choque total é também constante, isto é,  $\sigma_t = \pi r_0^2$ , a quantidade  $N_{\text{coll}}$  é independente da temperatura, de modo a que a simulação do gás de HS não exige especificar a temperatura do gás  $T_0$  nem o diâmetro das moléculas.

A fim de calcular o parâmetro de rarefação no caso do potencial AI, a viscosidade para uma dada temperatura de referência, no nosso caso 300 K, deve ser conhecida. Para He e Ar, a viscosidade foi calculada no capítulo 6 e comparada com outros dados disponíveis na literatura. A viscosidade de Kr foi calculada adicionalmente pela técnica DSMC com a precisão de 0,1%. A seção de choque total  $\sigma_t$  é calculada por meio do parâmetro de corte  $b_m$ , ou seja,  $\sigma_t = \pi b_m^2$ .

O número de partículas modelo utilizado oscila perto de 30 milhões, ou seja, há mais de três centenas de partículas modelo em cada célula. O tempo avança em passos discretos de magnitude  $\Delta t$  igual a  $0,005a/v_0$ . O número

de passos de tempo foi suficientemente alto para que a dispersão estatística fosse menor que o erro numérico. Essa dispersão cresce, aumentando a razão de pressão  $p_1/p_0$ . Nos cálculos presentes, o número de passos foi  $10^5$ ,  $2 \times 10^5$ ,  $4 \times 10^5$  e  $10^6$  para  $p_1/p_0 = 0,1$ ,  $0,3$ ,  $0,5$  e  $0,7$ , respectivamente. Estes números, que foram determinados através de vários testes de lançamento de processos com diferentes sementes, garantem a exatidão de 0,5% para o fluxo de massa. As propriedades dos gases e os parâmetros da matriz de deflexão são apresentados na tabela 8.1.

Tabela 8.1: Propriedades dos gases e parâmetros da matriz de deflexão.

Gás	$T_0$ (K)	$\mu$ ( $\mu\text{Pa s}$ )	$\tilde{\mu}$	$T^*$	$E_m$	$b_m/r_0$	$N_e$	$N_b$
He	300	19,91	0,1884	28,2	600	2	600	600
Ar	300	22,68	0,1101	2,15	50	3	600	900
Kr	50	4,987	0,04633	0,251	8	3	600	900
Kr	300	25,41	0,09637	1,50	40	3	600	900
Kr	2000	105,8	0,1554	10,0	300	3	600	900

## 8.2 Resultados e discussões

Os cálculos foram realizados para vários valores do parâmetro de rarefação  $\delta$  entre 0,05 e 100, de modo que toda a gama da rarefação do gás é coberta, incluindo os regimes de quase moléculas livres ( $\delta = 0,05$ ), de transição ( $\delta \sim 1$ ) e hidrodinâmico ( $\delta = 100$ ). Na maioria dos casos, a única temperatura de equilíbrio  $T_0 = 300$  K foi fixada. A fim de estudar a influência da temperatura do gás, dois valores adicionais, a saber,  $T_0 = 50$  K e  $T_0 = 2000$  K foram considerados para o Kr no caso  $p_1/p_0 = 0,7$ .

Quatro valores da razão de pressão  $p_1/p_0$  foram escolhidos, a saber, 0,1, 0,3, 0,5, e 0,7. O primeiro valor, 0,1, corresponde ao regime de onda de choque, ou seja, uma redução de  $p_1$  não irá alterar a taxa de fluxo. O valor  $p_1/p_0 = 0,5$  é crítico, isto é, um aumento de  $p_1$  conduzirá a uma diminuição da taxa de fluxo. O quarto valor  $p_1/p_0 = 0,7$  corresponde a uma pequena queda de pressão relativa. Assim, o comportamento da taxa de fluxo e do campo



de escoamento variam qualitativamente através do aumento da razão  $p_1/p_0$  de 0,1 a 0,7. Os valores numéricos de  $W$  são dados nas Tabelas 8.2, 8.3, 8.4 e 8.5 para as razões de pressão  $p_1/p_0 = 0,1; 0,3; 0,5$ , e  $0,7$ , respectivamente.

Tabela 8.2: Taxa de fluxo reduzida  $W$  para  $p_1/p_0 = 0,1$ .

$\delta$	$W$			
	HS	He 300 K	Ar 300 K	Kr 300 K
0	0,9	0,9	0,9	0,9
0,05	0,9038	0,9069	0,9065	0,9056
0,1	0,9109	0,9148	0,9141	0,9149
0,2	0,9261	0,9292	0,9306	0,9302
0,5	0,9703	0,9727	0,9742	0,9747
1,0	1,0349	1,0369	1,0384	1,0397
2,0	1,1415	1,1425	1,1448	1,1458
5,0	1,3281	1,3268	1,3269	1,3266
10	1,4390	1,4371	1,4357	1,4350
20	1,4994	1,4966	1,4946	1,4945
50	1,5267	1,5248	1,5229	1,5221
100	1,5282	1,5273	1,5260	1,5262

Tabela 8.3: Taxa de fluxo reduzida  $W$  para  $p_1/p_0 = 0,3$ .

$\delta$	$W$			
	HS	He 300 K	Ar 300 K	Kr 300 K
0	0,7	0,7	0,7	0,7
0,05	0,7046	0,7068	0,7059	0,7068
0,1	0,7104	0,7136	0,7140	0,7149
0,2	0,7241	0,7283	0,7279	0,7287
0,4	0,7529	0,7559	0,7568	0,7576
0,5	0,7670	0,7695	0,7709	0,7714
0,6	0,7802	0,7824	0,7845	0,7851
1	0,8319	0,8354	0,8371	0,8384
2	0,9511	0,9540	0,9570	0,9580
5	1,1961	1,1987	1,1999	1,1998
10	1,3522	1,3515	1,3504	1,3505
20	1,4292	1,4291	1,4282	1,4276
50	1,4678	1,4683	1,4682	1,4658
100	1,4743	1,4760	1,4730	1,4741

Tabela 8.4: Taxa de fluxo reduzida  $W$  para  $p_1/p_0 = 0,5$ .

$\delta$	$W$			
	HS	He 300 K	Ar 300 K	Kr 300 K
0	0,5	0,5	0,5	0,5
0,05	0,5036	0,5045	0,5050	0,5046
0,1	0,5086	0,5115	0,5117	0,5117
0,2	0,5205	0,5232	0,5242	0,5243
0,3	0,5336	0,5347	0,5360	0,5360
0,4	0,5445	0,5463	0,5478	0,5490
0,5	0,5566	0,5582	0,5599	0,5600
0,6	0,5679	0,5697	0,5711	0,5723
0,8	0,5905	0,5930	0,5945	0,5960
1	0,6131	0,6161	0,6179	0,6197
2	0,7238	0,7276	0,7304	0,7314
5	0,9921	0,9960	0,9978	0,9981
10	1,1932	1,1932	1,1935	1,1931
20	1,2910	1,2915	1,2907	1,2917
50	1,3413	1,3412	1,3401	1,3415
100	1,3474	1,3500	1,3492	1,3504

Tabela 8.5: Taxa de fluxo reduzida  $W$  para  $p_1/p_0 = 0,7$ .

$\delta$	$W$					
	HS	He	Ar	Kr		
		300 K	300 K	50 K	300 K	2000 K
0	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3
0,05	0,3020	0,3034	0,3039	0,3033	0,3033	0,3035
0,1	0,3052	0,3069	0,3077	0,3077	0,3079	0,3074
0,2	0,3134	0,3155	0,3161	0,3158	0,3164	0,3159
0,5	0,3385	0,3400	0,3410	0,3403	0,3416	0,3402
1	0,3787	0,3807	0,3824	0,3817	0,3831	0,3804
2	0,4594	0,4623	0,4646	0,4634	0,4657	0,4615
3	0,5396	0,5428	0,5447	0,5435	0,5463	0,5417
5	0,6862	0,6900	0,6920	0,6894	0,6921	0,6888
10	0,9170	0,9182	0,9188	0,9177	0,9190	0,9182
20	1,0427	1,0431	1,0431	1,0431	1,0433	1,0423
50	1,1050	1,1058	1,1047	1,1039	1,1068	1,1039
100	1,1177	1,1173	1,1168	1,1167	1,1178	1,1167

Para analisar a influência do potencial intermolecular, os desvios da taxa de fluxo com base no potencial AI  $W_{\text{AI}}$  na temperatura  $T_0 = 300$  K daquele com base no modelo de HS  $W_{\text{HS}}$  é plotado na Figura 8.2.

Pode ser visto que, para os elevados valores do parâmetro de rarefação ( $\delta \geq 10$ ) o desvio é sempre menor do que 0,5%, ou seja, sem influência do potencial dentro da precisão numérica. O maior desvio é observado no intervalo  $0,1 \leq \delta \leq 5$  em que é sempre positivo, ou seja, a taxa de fluxo para o potencial AI é maior do que aquele para o modelo de HS. A magnitude do desvio depende da razão de pressões  $p_1/p_0$ . Para o fluxo em regime de onda de choque, ou seja,  $p_1/p_0 = 0,1$ , o desvio não excede 0,5%, mas é perto desse valor. Para a razão de pressões  $p_1/p_0 = 0,3$ , o desvio excede a precisão numérica de 0,5% para Ar e Kr. Para a razão  $p_1/p_0 = 0,5$  e  $0,7$ , o desvio é significativo novamente para Ar e Kr e atinge o valor de 1,3%. O desvio para o gás mais leve, isto é, He, não excede 0,66% e é sempre menor do que para os outros gases, Ar e Kr.

A fim de comparar a diferença da taxa de fluxo para as diferentes espécies

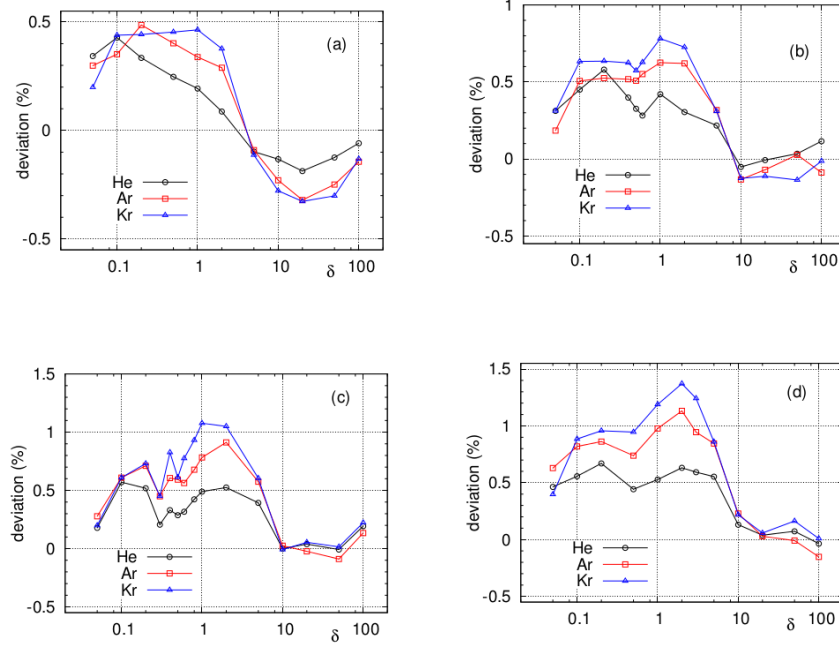


Figura 8.2: Desvio relativo  $(W_{AI} - W_{HS})/W_{HS}$  da taxa de fluxo  $W_{AI}$  baseada no potencial AI e para  $T_0 = 300$  K do  $W_{HS}$  baseado no modelo HS vs parâmetro de rarefação  $\delta$ : (a)  $p_1/p_0 = 0,1$ ; (b)  $p_1/p_0 = 0,3$ ; (c)  $p_1/p_0 = 0,5$ ; (d)  $p_1/p_0 = 0,7$ . Publicado originalmente em [41].

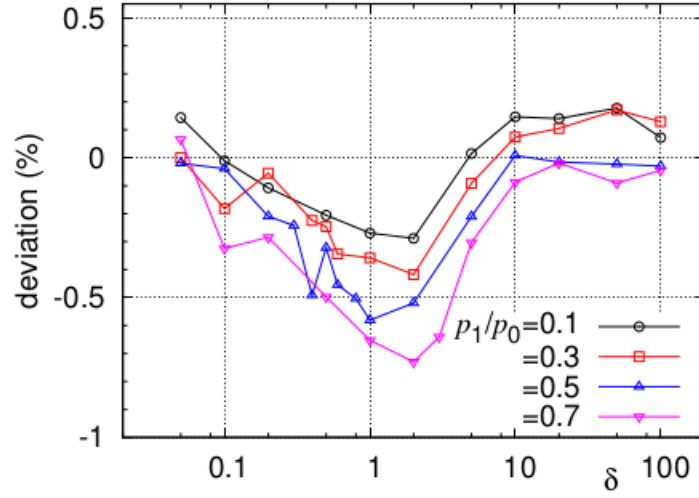


Figura 8.3: Desvio relativo  $(W_{\text{He}} - W_{\text{Kr}})/W_{\text{Kr}}$  da taxa de fluxo baseado no potencial AI para o Hélio  $W_{\text{He}}$  do para o Criptônio  $W_{\text{Kr}}$  vs parâmetro de rarefação  $\delta$  para  $T_0 = 300$  K. Publicado originalmente em [41].

de gás, o desvio da taxa de fluxo de He para Kr é plotado na Figura 8.3.

Para os valores de razão de pressão pequenos, ou seja,  $p_1/p_0 = 0,1$  e  $0,3$ , o desvio não excede a precisão numérica de  $0,5\%$ , enquanto que para os grandes valores, ou seja,  $p_1/p_0 = 0,5$  e  $0,7$ , o desvio é maior do que  $0,5\%$  e atinge  $0,7\%$ . A partir dos dados da temperatura fixada  $T_0 = 300$  K, pode-se concluir que a influência do potencial é maior para os gases com as menores temperaturas reduzidas  $T^*$ , como o caso de Kr. A fim de estudar a influência da temperatura do gás na taxa de fluxo, cálculos adicionais foram realizados para o gás Kr para  $T_0 = 50$  K e  $2000$  K. A Figura 8.4 mostra uma comparação destes dados com os dados numéricos em  $T_0 = 300$  K.

Os desvios para ambos  $T_0 = 50$  K e  $2000$  K são negativos, isto é, a dependência da taxa de fluxo  $W$  com a temperatura não é monótona, mas para temperaturas baixas ( $50$  K) e altas ( $2000$  K) é menor do que para a temperatura intermediária ( $300$  K). O desvio atinge o valor de  $-0,9\%$  em  $\delta = 2$  para  $T_0 = 2000$  K. Assim, a influência do potencial sobre a taxa de

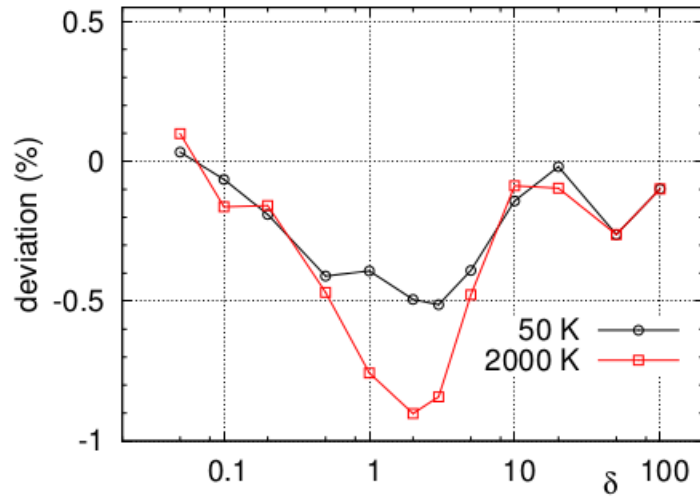


Figura 8.4: Desvio relativo  $(W - W_{300})/W_{300}$  da taxa de fluxo baseada no potencial AI para criptônio  $W$  para  $T_0 = 50$  K e 2000 K do  $W_{300}$  correspondente a  $T_0 = 300$  K vs parâmetro de rarefação  $\delta$  para  $p_1/p_0 = 0,7$ . Publicado originalmente em [41].

fluxo nem sempre aumenta diminuindo a temperatura reduzida.

Os casos mais interessantes para a comparação dos campos de escoamento são aqueles com o disco de Mach, ou seja, quando  $\delta = 100$  e  $p_1/p_0 = 0,1$  e  $0,3$  apresentados nas Figuras 8.5 e 8.6, respectivamente. Discos de Mach são uma formação de ondas estacionárias que surgem em escoamentos supersônicos.

Ambas as figuras mostram que as posições dos discos de Mach não são afetadas pelo potencial intermolecular, enquanto que a sua intensidade é sensível ao potencial. As variações da densidade  $n/n_0$ , temperatura  $T/T_0$  e velocidade hidrodinâmica  $u_x/v_0$  nos discos e a espessura do disco, ou seja, a distância entre os valores mínimo e máximo de densidade, são dadas na Tabela 8.6. Outros casos são mostrados nas figuras 8.7, 8.8, 8.9, porém nestes não há ondas de choque. Uma das figuras, temperatura para  $\delta = 0,1$ , mostra grande dispersão estatística.

Tabela 8.6: Alcance de variação de densidade  $n/n_0$ , temperatura  $T/T_0$  e velocidade hidrodinâmica  $u_x/v_0$  no primeiro disco de Mach e sua espessura  $d/a$

	HS	Kr, 300 K
$p_1/p_0 = 0,1$		
$n/n_0$	0,0711 a 0,304	0,0574 a 0,326
$T/T_0$	0,191 a 0,731	0,163 a 0,794
$u_x/v_0$	1,42 a 0,824	1,45 a 0,713
$d/a$	1,35	1,05
$p_1/p_0 = 0,3$		
$n/n_0$	0,369 a 0,552	0,365 a 0,566
$T/T_0$	0,527 a 0,699	0,519 a 0,703
$u_x/v_0$	1,09 a 0,874	1,10 a 0,863
$d/a$	0,80	0,80

Mostra-se que as variações para pequena razão de pressões  $p_1/p_0 = 0,1$  são bastante diferentes para HS e Kr, enquanto são semelhantes em  $p_1/p_0 = 0,3$ . A espessura do disco para Kr é 30% menor do que aquele para o modelo de HS para  $p_1/p_0 = 0,1$ . As espessuras são as mesmas para ambos HS e potenciais AI em  $p_1/p_0 = 0,3$ .



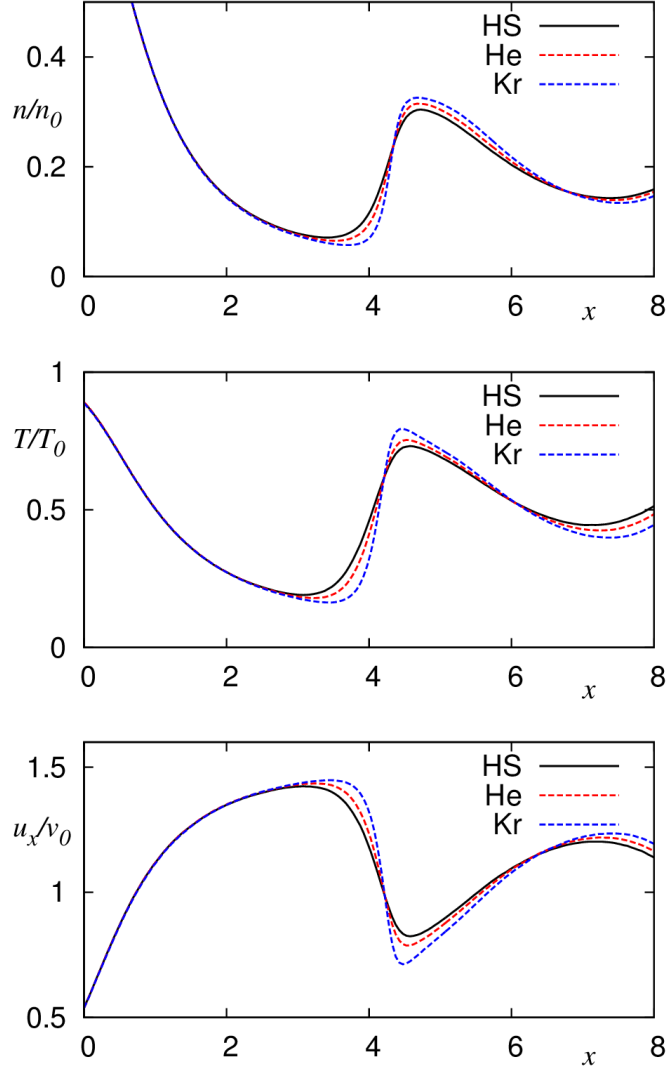


Figura 8.5: Distribuições de densidade  $n/n_0$ , temperatura  $T/T_0$  e velocidade hidrodinâmica  $u_x/v_0$  ao longo do eixo ( $r = 0$ ) para  $\delta = 100$  e  $p_1/p_0 = 0,1$ . As distribuições para He e Kr correspondem a  $T_0 = 300$  K. Publicado originalmente em [41].

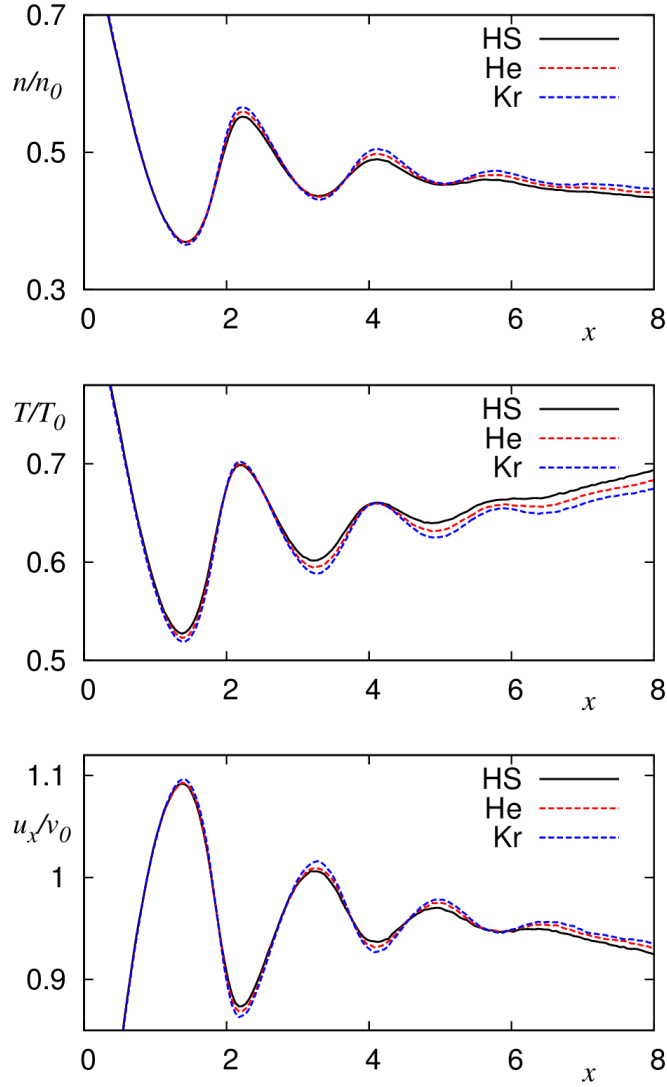


Figura 8.6: Distribuições de densidade  $n/n_0$ , temperatura  $T/T_0$  e velocidade hidrodinâmica  $u_x/v_0$  ao longo do eixo ( $r = 0$ ) para  $\delta = 100$  e  $p_1/p_0 = 0,3$ . As distribuições para He e Kr correspondem a  $T_0 = 300$  K. Publicado originalmente em [41].

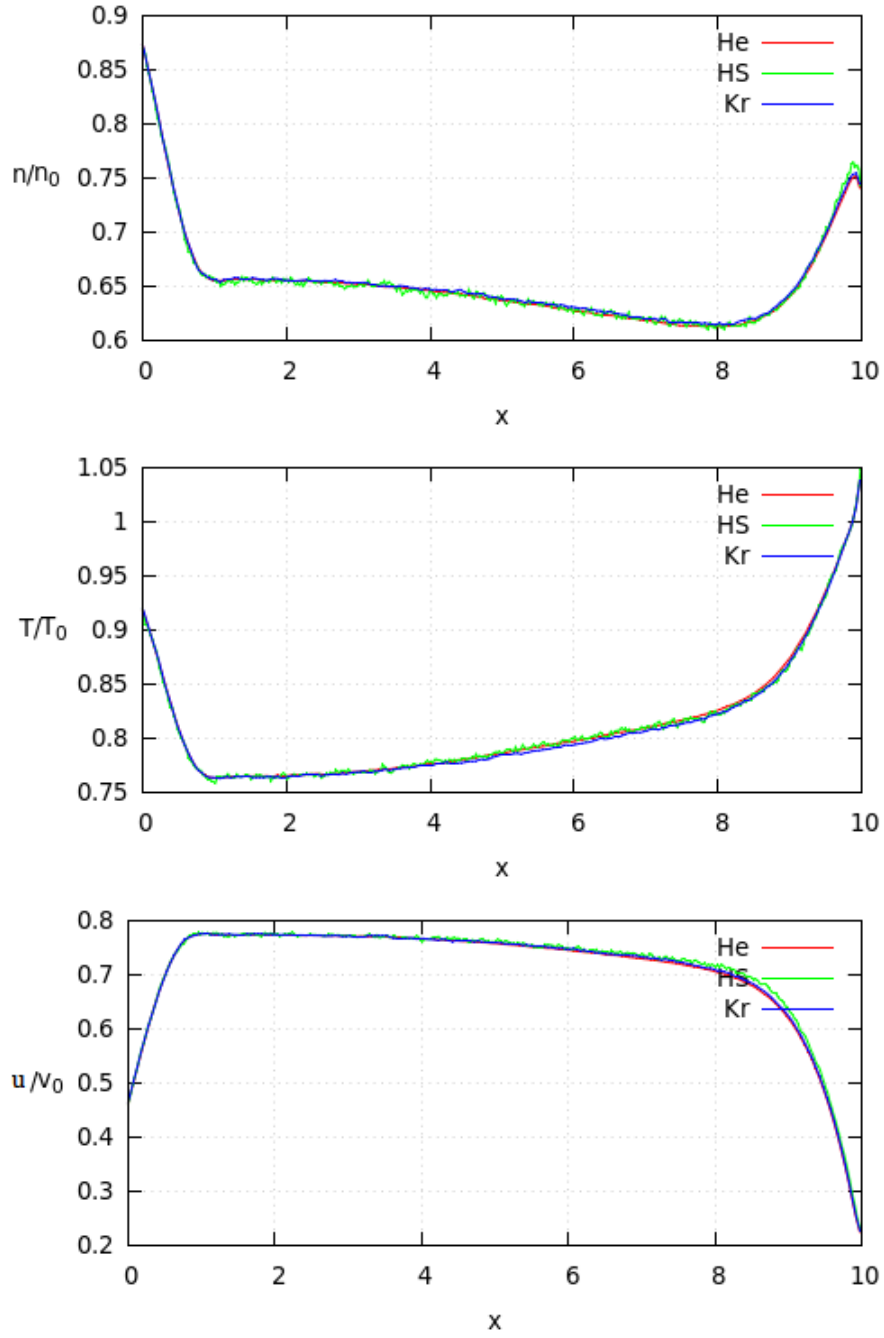


Figura 8.7: Distribuições de densidade  $n/n_0$ , temperatura  $T/T_0$  e velocidade hidrodinâmica  $u_x/v_0$  ao longo do eixo ( $r = 0$ ) para  $\delta = 100$  e  $p_1/p_0 = 0,5$ . As distribuições para He e Kr correspondem a  $T_0 = 300$  K.

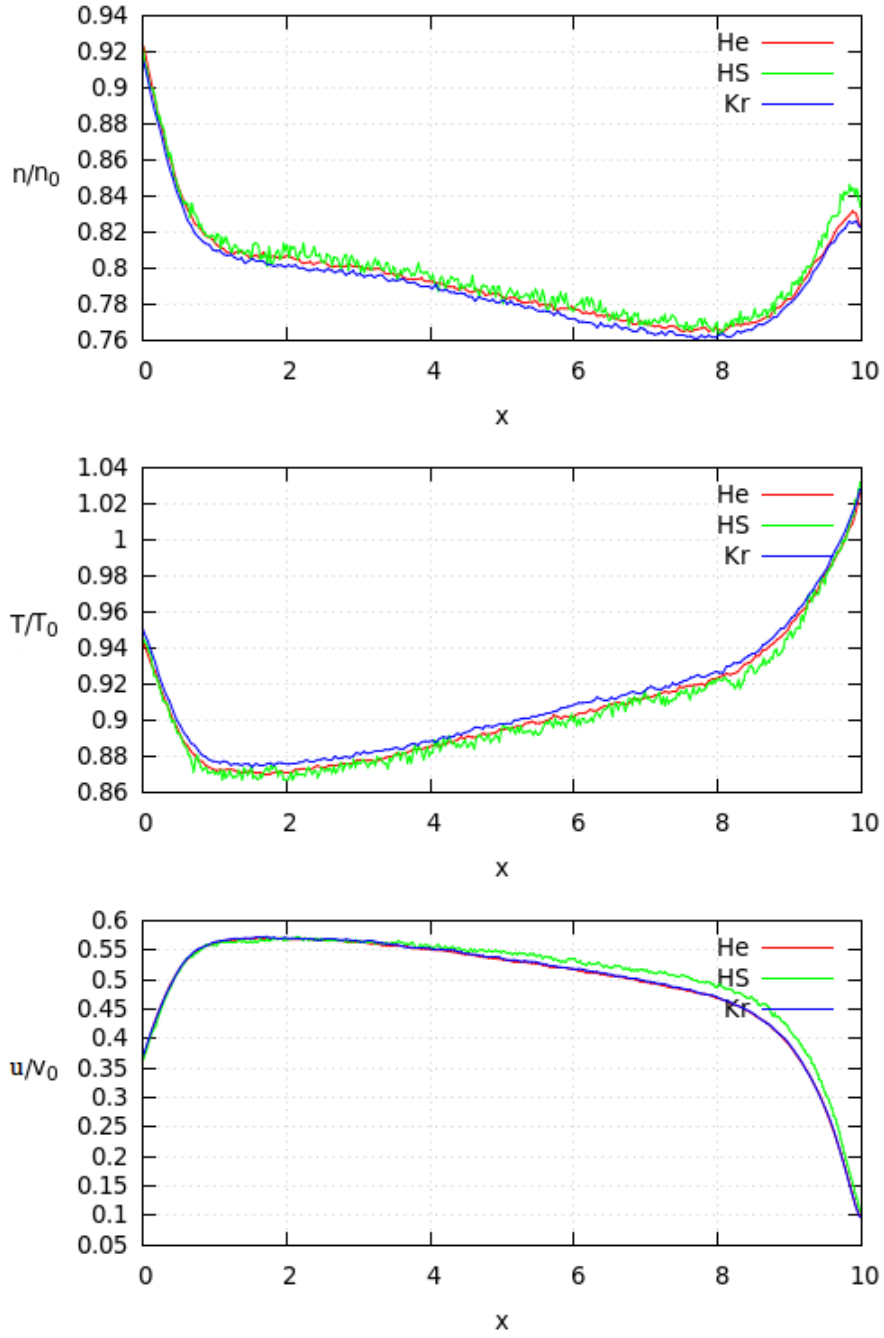


Figura 8.8: Distribuições de densidade  $n/n_0$ , temperatura  $T/T_0$  e velocidade hidrodinâmica  $u_x/v_0$  ao longo do eixo ( $r = 0$ ) para  $\delta = 100$  e  $p_1/p_0 = 0,7$ . As distribuições para He e Kr correspondem a  $T_0 = 300$  K.

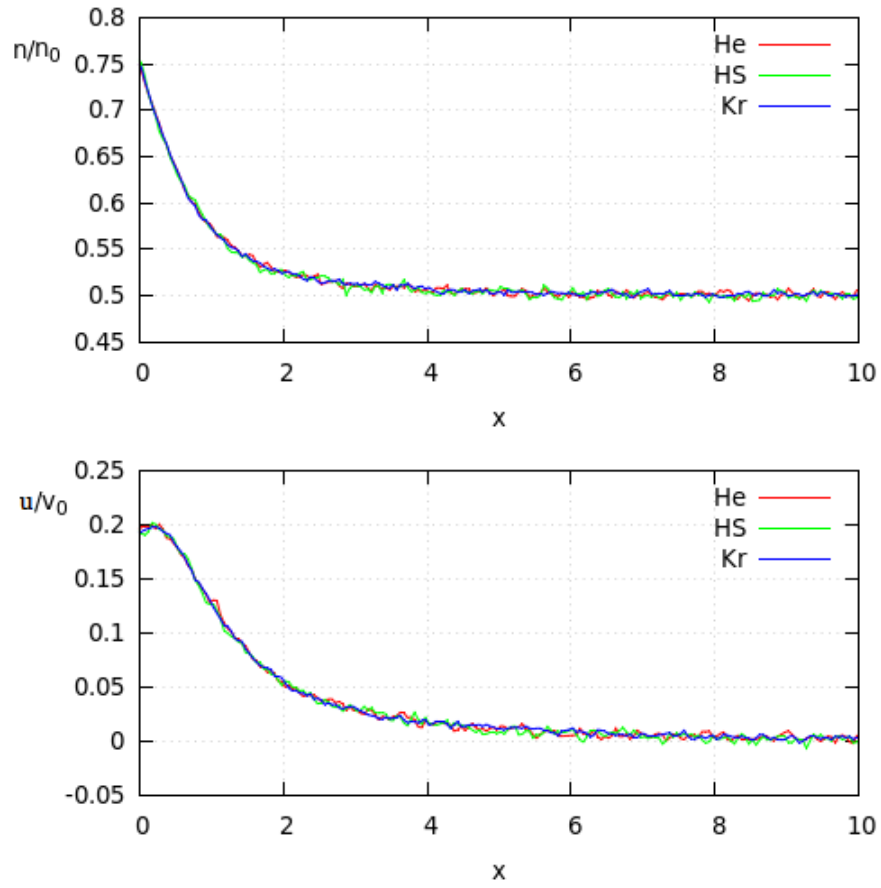


Figura 8.9: Distribuições de densidade  $n/n_0$  e velocidade hidrodinâmica  $u_x/v_0$  ao longo do eixo ( $r = 0$ ) para  $\delta = 0,1$  e  $p_1/p_0 = 0,5$ . As distribuições para He e Kr correspondem a  $T_0 = 300$  K.

# Capítulo 9

## Conclusões

### 9.1 Potencial arbitrário

Um esquema simples para implementar um potencial intermolecular arbitrário no método DSMC foi proposto. Este esquema consiste basicamente no uso de uma tabela pré-calculada onde temos o ângulo de deflexão em termos da energia relativa e do parâmetro de impacto. Para avaliar o esforço computacional desse esquema, dois problemas de referência foram resolvidos empregando o potencial de LJ. Uma comparação dos resultados numéricos com as soluções analíticas correspondentes mostrou uma boa concordância. O tempo de CPU do novo esquema é apenas ligeiramente superior ao do modelo de esferas rígidas. Se o ângulo de deflexão é calculado para cada colisão, o tempo de processamento que fornece os mesmos resultados aumenta em duas ordens de grandeza. Já que dados confiáveis sobre o potencial intermolecular estão disponíveis na literatura, um emprego do esquema proposto dispensa o uso de modelos amplamente utilizados como o de esferas rígidas variáveis, esfera mole variável e qualquer outro modelo similar.

### 9.2 Potencial *ab initio*

Potenciais AI foram implementados na DSMC. Tal implementação nos permite calcular fluxos de gás em qualquer rarefação AI, ou seja, não é

necessário nenhum parâmetro extraído de dados experimentais. A implementação do potencial AI requer praticamente o mesmo esforço computacional do que a aplicação dos modelos moleculares amplamente utilizadas, tais como esferas rígidas, esfera rígida variável, esfera mole variável, etc. Assim, se os potenciais AI de um gás específico ou para uma mistura específica são conhecidos, outros modelos de potencial podem ser dispensados. Como um exemplo da implementação, a viscosidade e a condutividade térmica foram calculadas com a incerteza de 0,5% para uma mistura de hélio e argônio. Incerteza menor que esta não teria sentido uma vez que conforme mostrado por Benites, 2015 [dissertação de mestrado], [163], a imprecisão do próprio potencial é da ordem de 0,6%, bem como a influência de efeitos quânticos é da ordem de 0,5%. A viscosidade e a condutividade térmica foram calculadas com uma precisão mais elevada do que a do artigo publicado anteriormente [66] com base no método de Chapman-Enskog aplicando o mesmo potencial. Os resultados numéricos relatados podem ser utilizados para verificação de equações cinéticas modelo e novos métodos para resolver a equação de Boltzmann. Digno de nota é que Benites, 2015, obteve resultados que coincidem com os nossos, dentro da precisão numérica, e com um método totalmente diferente e mais complexo.

## 9.3 Couette e Transferência de Calor

### 9.3.1 Couette

O escoamento plano de Couette de uma mistura de He-Ar foi calculado pelo método da DSMC baseado no potencial AI e também no modelo de esfera rígida. Os cálculos foram efetuados para velocidades de parede pequena e grande com o erro numérico do tensor de cisalhamento menor que 0,5%. Soluções analíticas foram obtidas nos limites hidrodinâmico e de moléculas livres. Os dados numéricos juntamente com as soluções analíticas cobrem toda a gama da rarefação do gás.

Uma comparação do tensor de cisalhamento calculado para o potencial AI e para o de esferas rígidas mostrou que para pequena velocidade da parede a influência do potencial intermolecular é dentro de 1% no regime de transição, enquanto no hidrodinâmico e perto do regime de moléculas livres a influência não excede o erro numérico. Para a velocidade da parede grande, o tensor de cisalhamento é afetado pelo potencial muito mais fortemente, isto é, no regime hidrodinâmico a diferença entre os resultados obtidos com base nos diferentes potenciais atinge 6%.

Para verificar a confiabilidade da equação modelo de McCormack, uma comparação entre os resultados obtidos no artigo [97] utilizando este modelo com os resultados deste trabalho foi realizada o valor da velocidade da parede pequeno. Verificou-se que a diferença é de cerca de 1% no regime de transição. Assim, se a velocidade da parede é pequena a equação do modelo McCormack fornece resultados confiáveis dentro da incerteza de 1%. Tal conclusão é importante porque uma solução numérica da equação modelo MC requer esforço computacional bastante modesto em comparação com uma solução numérica da equação de Boltzmann ou com aplicações do método DSMC.

O gradiente de velocidade no ponto médio do intervalo para o potencial AI é tabelado e comparado com o do modelo de HS. A diferença relativa do gradiente para estes dois potenciais atinge 4% para a velocidade de parede maior e para a faixa do parâmetro de rarefação  $0,1 \leq \delta \leq 40$ . Perto do regime de moléculas livres ( $\delta = 0,01$ ), o gradiente de velocidade é muito pequeno.

A distribuição de temperatura para o valor mais elevado de velocidade da parede é apresentada graficamente e o seu valor no ponto médio para o potencial AI é tabelado. Uma comparação destes valores com aqueles obtidos para o modelo de HS mostra que a diferença chega a 2% no regime de transição.

Foi apontado que a fração molar nos regimes de transição e hidrodinâmico desvia de seu valor de equilíbrio. O grau do desvio é significativamente afetado pelo potencial intermolecular, mas o valor absoluto da fração molar varia



dentro de 2% ao substituir o potencial AI pelo de HS.

Os dados apresentados podem ser utilizados como referência para novos métodos de DGR e equações cinéticas modelo.

### 9.3.2 Transferência de calor

A transferência de calor plana por meio de uma mistura He-Ar foi calculada pelo método da DSMC baseado no potencial AI e também para o modelo molecular de esfera rígida. Os cálculos foram realizados para pequenos e grandes valores da diferença de temperatura ao longo de uma vasta gama de valores de rarefação do gás com erro numérico do fluxo de calor inferior a 0,5%. Soluções analíticas foram obtidas nos limites hidrodinâmico e de moléculas livres.

Uma comparação do fluxo de calor calculado para o potencial AI e para esferas rígidas mostrou que a influência do potencial intermolecular é significativa, ou seja, cerca de 8% para ambas, a pequena e a grande diferença de temperatura.

Para verificar a confiabilidade da equação modelo de McCormack, uma comparação entre os resultados obtidos no artigo [77] usando este modelo com os resultados deste trabalho foi realizada para um valor da diferença de temperatura pequeno. Verificou-se que a diferença é de cerca de 2% no regime hidrodinâmico. Assim, se a diferença de temperatura é pequena a equação do modelo McCormack fornece resultados confiáveis dentro da incerteza de 2%. Tal conclusão é importante porque uma solução numérica da equação modelo requer esforço computacional bastante modesto em comparação com uma solução numérica da equação de Boltzmann ou uma aplicação do método DSMC.

O perfil de temperatura é apresentado graficamente e os seus valores nas superfícies são tabulados para uma grande diferença de temperatura. Verificou-se que o perfil de temperatura é fracamente afetado pela composição química e potencial intermolecular.

O perfil de fração molar também é apresentado de forma gráfica e em tabelas. Mostra-se que a fração molar varia significativamente de uma placa para a outra nos regimes de transição e hidrodinâmico. Além disso, é altamente sensível ao potencial molecular, de modo que um potencial físico, por exemplo, AI, deve ser usado se alguém está interessado em resultados rigorosos sobre a distribuição de fração molar de uma mistura não-isotérmica.

Os dados apresentados podem ser usados como referência para novos métodos de dinâmica dos gases rarefeitos e de novas equações cinéticas modelo.

## 9.4 Escoamento através de um Orifício

Um fluxo de gás rarefeito através de um orifício, numa partição fina, foi calculado para hélio, argônio e criptônio, aplicando o método DSMC com base no potencial AI. Os cálculos foram realizados para a rarefação do gás variando no intervalo de 0,05 a 100, para vários valores da razão de pressão, incluindo os regimes de onda de choque e sem choque do escoamento. Na maioria dos casos, a temperatura do gás é assumida ser 300 K. Alguns casos foram calculados para as temperaturas de 50 K e 2000 K. Os parâmetros do esquema numérico foram escolhidos para garantir o erro numérico inferior a 0,5%. A fim de destacar a precisão dos modelos moleculares simplificados, cálculos adicionais foram realizados para o potencial de HS com a mesma precisão numérica. Uma análise comparativa mostrou que a diferença relativa da taxa de fluxo do potencial AI para o obtido para o modelo molecular de HS depende de muitos fatores, a saber, espécies de gás, parâmetro de rarefação, e a razão entre as pressões. Entre os gases considerados aqui, a diferença para o Hélio é menor e não excede 0,7%. O desvio do Criptônio para HS é o maior e chega a 1,4%. Um desvio relativo da taxa de fluxo devido à variação de temperatura está dentro de 0,9%. Os campos de fluxo para o potencial AI são apenas ligeiramente diferentes daqueles para o modelo de HS. Os discos de Mach que aparecem após o orifício nos fluxos em regime de onda de choque

são mais intensos para o potencial AI do que para o modelo de esferas rígidas.

Assim, se uma incerteza de 2% ou mais é suficiente, em alguns cálculos práticos, então os resultados numéricos obtidos com base no modelo molecular de esfera rígida, ver por exemplo Refs. [125, 144, 145, 168–175], podem ser aplicados com sucesso para qualquer gás monoatômico em qualquer temperatura. No entanto, se a incerteza tiver que ser menor do que 2%, então, os cálculos devem ser efetuados aplicando-se o potencial de AI para um gás específico a uma temperatura específica.

## 9.5 Trabalhos futuros

O desenvolvimento futuro dessa tese inclui o cálculo do escoamento através de orifício para mistura binária de He e Ar, e o de aerotermodinâmica de Satélites, considerando a atmosfera composta como uma mistura gasosa.

# Referências Bibliográficas

- [1] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Fluid Mechanics* (Pergamon, New York, 1989).
- [2] J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, and R. B. Bird, *The Molecular Theory of Gases and Liquids* (Wiley, New York, 1954).
- [3] J. H. Ferziger and H. G. Kaper, *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases* (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1972).
- [4] M. Knudsen, “Die molekularstromung der gase durch offnungen und die effusion,” *Ann. Phys.* **28**, 999 (1909).
- [5] J. Herapath, “On the physical properties of gases,” *Annals of Philosophy* **VIII**, 56–60 (1816).
- [6] J. J. Waterston, “On the physics of media that are composed of free and perfectly elastic molecules in a state of motion,” *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A*, **183**, 179 (1892).
- [7] R. Clausius, “Ueber die Art der Bewegung, welche wir Wärme nennen,” *Annalen der Physik* **100**, 353–379 (1857).
- [8] S. Chapman and T. G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases* (University Press, Cambridge, 1952).
- [9] C. Cercignani, *Rarefied Gas Dynamics. From Basic Concepts to Actual Calculations* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).

- [10] M. N. Kogan, *Rarefied Gas Dynamics* (Plenum, New York, 1969).
- [11] V. P. Shidlovskiy, *Introduction to Dynamics of rarefied gas* (Nauka, Moscow, 1965), [in Russian].
- [12] Y. A. Koshmarov and Y. A. Ryzhov, *The Applied Dynamics of a Rarefied Gas* (Izd. Mashinostroenie, Moscow, 1977).
- [13] G. A. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* (Oxford University Press, Oxford, 1994).
- [14] G. A. Bird, *Molecular Gas Dynamics* (Clarendon Press, Oxford, 1976).
- [15] E. H. Kennard, *Kinetic Theory of Gases* (McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, 1938).
- [16] E. M. Lifshitz and L. P. Pitaevskii, *Theoretical Physics. X. Physical Kinetics* (Nauka, Moscow, 1979), [in Russian].
- [17] Y. Sone, *Molecular Gas Dynamics. Theory, Techniques and Applications* (Birkhäuser, Boston, 2007).
- [18] F. Sharipov, “Onsager-Casimir reciprocity relations for open gaseous systems at arbitrary rarefaction. I. General theory for single gas,” *Physica A* **203**, 437–456 (1994).
- [19] F. Sharipov, “Onsager-Casimir reciprocity relations for open gaseous systems at arbitrary rarefaction. II. Application of the theory for single gas,” *Physica A* **203**, 457–485 (1994).
- [20] F. Sharipov, “Hypersonic flow of rarefied gas near the Brazilian satellite during its reentry into atmosphere,” *Brazilian J. Phys.* **33**, 398–405 (2003).
- [21] D. V. Kozak and F. Sharipov, “Aerothermodynamics of satellite during atmospheric re-entry for the whole range of gas rarefaction: Influence of inelastic intermolecular collisions,” *Braz. J. Phys.* **43**, 192–206 (2012).

- [22] F. Sharipov, “Aerothermodynamics of Brazilian reusable satellite,” in *Aerothermodynamics for Space Vehicles*, R. A. Harris, ed., pp. 373–379 (2002).
- [23] F. Sharipov, “Direct simulation Monte Carlo method applied to aerothermodynamics,” *J. Braz. Soc. Mechanical Sciences* **23**, 441–452 (2001).
- [24] W. F. N. Santos, “Aerothermodynamic analysis of a reentry Brazilian satellite,” *Braz. J. Phys.* **42**, 373–390 (2012).
- [25] X. Luo, O. B. Malyshev, C. Day, V. Hauer, R. Reid, and F. Sharipov, “Monte Carlo simulation of gas flow through the KATRIN DPS2-F differential pumping system,” *Vacuum* **80**, 864–869 (2006).
- [26] O. B. Malyshev, C. Day, X. Luo, and F. Sharipov, “Tritium gas flow dynamics through the source and transport system of the KATRIN experiment,” *J. Vac Sci. Technol. A* **27**, 73–81 (2009).
- [27] M. Babutzka, M. Bahr, J. Bonn, B. Bornschein, A. Amadeus Dieter, G. Drexlin, K. Eitel, S. Fischer, F. Glueck, S. Grohmann, M. Hotzel, T. James, W. Kaefer, M. Lebel, B. Monreal, F. Priester, M. Roellig, M. Schloesser, U. Schmitt, F. Sharipov, M. Steidl, M. Sturm, H. Telle, and N. Titov, “Monitoring of the operating parameters of the KATRIN windowless gaseous tritium source,” *New J. Phys.* **14**, 103 046.1–29 (2012).
- [28] O. B. Malyshev, “Gas dynamics modelling for particle accelerators,” *Vacuum* **86**, 1669–1681 (2012).
- [29] F. Sharipov, “Rarefied gas dynamics and its applications to vacuum technology,” in *Vacuum in Accelerators* (2006).
- [30] K. Jousten, G. Messer, and D. Wandrey, “A precision gas flowmeter for vacuum metrology,” *Vacuum* **44**, 135–141 (1993).

- [31] L. Peksa, T. Gronych, M. Jeřáb, M. Vičar, F. Staněk, Z. Krajíček, and D. Pražák, “Implementation of multi-opening orifices in the primary metrology of vacuums and small gas throughputs,” *Vacuum* **101**, 377–381 (2014).
- [32] W. Sabuga, F. F. Sharipov, and T. Priruenrom, “Determination of the effective area of piston-cylinder assemblies using rarefied gas flow model,” in *Pressure and Vacuum Metrology* (2011).
- [33] Y. A. Anikin, O. I. Dodulad, Y. Y. Kloss, D. Martynov, P. V. Shuvalov, and F. Tcheremissine, “Development of applied software for analysis of gas flows in vacuum devices,” *Vacuum* **86**, 1770–1777 (2012).
- [34] S. T. Barashkin, *Experimental investigation of flows of gas into vacuum*, Ph.D. thesis, Ural State Tech. University (1977), [in Russian].
- [35] F. Sharipov, “Micro- and Nanoscale Gas Dynamics,” in *Encyclopedia of Microfluidics and Nanofluidics*, D. Li, ed. (Springer, New York, 2008), pp. 1281–1287.
- [36] F. Sharipov, “Gas Flow in Nanochannels,” in *Encyclopedia of Microfluidics and Nanofluidics*, D. Li, ed. (Springer, New York, 2008), pp. 772–778.
- [37] F. Sharipov and J. L. Strapasson, “Direct simulation Monte Carlo method for an arbitrary intermolecular potential,” *Phys. Fluids* **24**, 011 703 (2012).
- [38] F. Sharipov and J. L. Strapasson, “*Ab initio* simulation of transport phenomena in rarefied gases,” *Phys. Rev. E* **86**, 031 130 (2012).
- [39] F. Sharipov and J. L. Strapasson, “Benchmark problems for mixtures of rarefied gases. I. Couette flow,” *Phys. Fluids* **25**, 027 101 (2013).

- [40] J. L. Strapasson and F. Sharipov, “*Ab initio* simulation of heat transfer through a mixture of rarefied gases,” *Int. J. Heat Mass Transfer* **71**, 91–97 (2014).
- [41] F. Sharipov and J. L. Strapasson, “*Ab initio* simulation of rarefied gas flow through a thin orifice,” *Vacuum* **109**, 246–252 (2014).
- [42] F. Sharipov, “Analytical and Numerical Calculations of Rarefied Gas Flow,” in *Handbook of Vacuum Technology*, K. Jousten, ed. (Wiley-VCH Verlag, Weinheim, 2008).
- [43] C. Cercignani, *The Boltzmann Equation and its Application* (Springer-Verlag, New York, 1988).
- [44] C. Cercignani, *Theory and Application of the Boltzmann Equation* (Scottish Academic Press, Edinburgh, 1975).
- [45] C. Cercignani, “The Boltzmann equation in the 20th century,” *Discrete and Continuous Dynamical Systems* **24**, 83–94 (2009).
- [46] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, and M. A. Krook, “A model for collision processes in gases,” *Phys. Rev.* **94**, 511–525 (1954).
- [47] P. Welander, “On the temperature jump in a rarefied gas,” *Ark. Fys.* **7**, 507–553 (1954).
- [48] E. M. Shakhov, “Generalization of the Krook kinetic relaxation equation,” *Fluid Dynamics* **3**, 95–96 (1968).
- [49] F. J. McCormack, “Construction of linearized kinetic models for gaseous mixture and molecular gases,” *Phys. Fluids* **16**, 2095–2105 (1973).
- [50] H. Goldstein, *Classical mechanics* (Addison-Wesley, 1980).
- [51] G. A. Bird, “Definition of mean free path for real gases,” *Phys. Fluids* **26**, 3222–3223 (1983).



- [52] K. Koura and H. Matsumoto, “Variable soft sphere molecular-model for inverse-power-law of Lennard-Jones potential,” *Phys. Fluids* **3**, 2459–2465 (1991).
- [53] K. Koura, H. Matsumoto, and T. Shimada, “A test of equivalence of the variable-hard-sphere and inverse-power-law models in the direct-simulation Monte-Carlo method,” *Phys. Fluids* **3**, 1835–1837 (1991).
- [54] J. Kestin, K. Knierim, E. A. Mason, B. Najafi, S. T. Ro, and M. Waldman, “Equilibrium and transport properties of the noble gases and their mixture at low densities,” *J. Phys. Chem. Ref. Data* **13**, 229–303 (1984).
- [55] T. Korona, H. L. Williams, R. Bukowski, B. Jeziorski, and K. Szalewicz, “Helium dimer potential from symmetry-adapted perturbation theory calculations using large Gaussian geminal and orbital basis sets,” *J. Chem. Phys.* **106**, 5109–5122 (1997).
- [56] S. M. Cybulski and R. R. Toczyłowski, “Ground state potential energy curves for He<sub>2</sub>, Ne<sub>2</sub>, Ar<sub>2</sub>, He-Ne, He-Ar, and Ne-Ar: A coupled-cluster study,” *J. Chem. Phys.* **111**, 10 520–10 528 (1999).
- [57] A. Nasrabad and U. Deiters, “Prediction of thermodynamic properties of krypton by Monte Carlo simulation using ab initio interaction potentials,” *J. Chem. Phys.* **119**, 947–952 (2003).
- [58] A. L. Lindsay and L. A. Bromley, “Thermal conductivity of gas mixtures,” *Ind. Eng. Chem* **42**, 1508–1511 (1950).
- [59] E. A. Mason and S. C. Saxena, “Approximate formula for the thermal conductivity of gas mixtures,” *Phys. Fluids* **1**, 361–369 (1958).
- [60] C. Muckenfuss and C. Curtiss, “Thermal conductivity of multicomponent gas mixtures,” *J. Chem. Phys.* **29**, 1273–1277 (1958).

- [61] R. S. Brokaw, “Thermal conductivity of gas mixtures in chemical equilibrium. II,” *J. Chem. Phys.* **32**, 1005–1006 (1960).
- [62] E. Bich, R. Hellmann, and E. Vogel, “Ab initio potential energy curve for the helium atom pair and thermophysical properties of the dilute helium gas. II. Thermophysical standard values for low-density helium,” *Mol. Phys.* **105**, 3035–3049 (2007).
- [63] E. Vogel, B. Jaeger, R. Hellmann, and E. Bich, “Ab initio pair potential energy curve for the argon atom pair and thermophysical properties for the dilute argon gas. II. Thermophysical properties for low-density argon,” *Mol. Phys.* **108**, 3335–3352 (2010).
- [64] F. Sharipov and G. Bertoldo, “Numerical solution of the linearized Boltzmann equation for an arbitrary intermolecular potential,” *J. Comp. Phys.* **228**, 3345–3357 (2009).
- [65] E. L. Tipton, R. V. Thompson, and S. K. Loyalka, “Chapman-Enskog solutions to arbitrary order in Sonine polynomials III: Diffusion, thermal diffusion, and thermal conductivity in a binary, rigid-sphere, gas mixture,” *Eur. J. Mech. B-Fluids* **28**, 353–386 (2009).
- [66] B. Song, X. Wang, J. Wu, and Z. Liu, “Prediction of transport properties of pure noble gases and some of their binary mixtures by ab initio calculations,” *Fluid Phase Equilibria* **290**, 55–62 (2010).
- [67] C. F. Curtiss and J. O. Hirschfelder, “Transport properties of multi-component gas mixtures,” *J. Chem. Phys.* **17**, 550–555 (1949).
- [68] C. Wilke, “A viscosity equation for gas mixtures,” *J. Chem. Phys.* **18**, 517–519 (1950).
- [69] J. Bzowski, J. Kestin, E. A. Mason, and F. J. Uribe, “Equilibrium and transport properties of gas mixtures at low density: Eleven polyatomic

- gases and five noble gases,” *J. Phys. Chem. Ref. Data* **19**, 1179–1232 (1990).
- [70] E. L. Tipton, R. V. Thompson, and S. K. Loyalka, “Chapman-Enskog solutions to arbitrary order in Sonine polynomials II: Viscosity in a binary, rigid-sphere, gas mixture,” *Eur. J. Mech. B-Fluids* **28**, 335–352 (2009).
- [71] S. A. Beresnev and V. G. Chernyak, “Thermophoresis of spherical aerosol particle at arbitrary Knudsen number. Statement of the problem and method of solution,” *Teplofizika Vysokikh Temperatur* **24**, 313–321 (1986).
- [72] Y. Huang, Q. Yu, Q. Chen, and R. Wang, “Viscosity of liquid and gaseous helium-3 from 3 mK to 500 K,” *Cryogenics* **52**, 538–543 (2012).
- [73] O. I. Dodulad, Y. Y. Kloss, D. O. Savichkin, and F. G. Tcheremissine, “Knudsen pumps modeling with Lennard-Jones and ab initio intermolecular potentials,” *Vacuum* **109**, 360–367 (2014).
- [74] P. Bassanini, C. Cercignani, and C. Pagani, “Comparison of kinetic theory analysis of linearized heat transfer between parallel plates,” *Int. J. Heat Mass Transfer*. **10**, 447–460 (1967).
- [75] P. Bassanini, C. Cercignani, and C. Pagani, “Influence of the accommodation coefficient on the heat transfer in a rarefied gas,” *Int. J. Heat Mass Transfer*. **11**, 1359–1369 (1968).
- [76] C. E. Siewert, “A discrete-ordinates solution for heat transfer in a plane channel,” *J. Comp. Physics* **152**, 251–263 (1999).
- [77] F. Sharipov, L. M. G. Cumin, and D. Kalempa, “Heat flux through a binary gaseous mixture over the whole range of the Knudsen number,” *Physica A* **378**, 183–193 (2007).

- [78] D. Valougeorgis and J. R. Thomas, “The  $F_N$ -method in kinetic theory: II. Heat transfer between parallel plates,” *Transport Theory Stat. Phys.* **14**, 497–512 (1985).
- [79] R. D. M. Garcia and C. E. Siewert, “The McCormack model for gas mixtures: Heat transfer in a plane channel,” *Phys. Fluids* **16**, 3393–3402 (2004).
- [80] V. V. Aristov, M. S. Ivanov, and F. G. Cheremisin, “Two methods for solving the problem of heat transfer in a rarefied gas,” *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics* **30**, 193–195 (1990).
- [81] I. A. Graur and A. P. Polikarpov, “Comparison of different kinetic models for the heat transfer problem,” *Heat Mass Transf.* **46**, 237–244 (2009).
- [82] C. S. Scherer, J. Prolo Filho, and L. Barichello, “An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in the rarefied gas dynamics. II. Heat transfer problems,” *Z. Angew. Math. Phys.(ZAMP)* **60**, 651–687 (2009).
- [83] S. Kosuge, K. Aoki, and S. Takata, “Heat transfer in a gas mixture between two parallel plates: finite-difference analysis of the Boltzmann equation,” in *Rarefied Gas Dynamics*, T. J. Bartel and M. A. Gallis, eds., **585**, 289–296 (2001).
- [84] A. A. Raines, “Heat Transfer in a Gas Mixture between Parallel Plates,” *Comput. Math. Math. Phys.* **48**, 306–313 (2008).
- [85] C. Cercignani and C. D. Pagani, “Variational approach to boundary value problems in kinetic theory,” *Phys. Fluids* **9**, 1167–1173 (1966).
- [86] P. L. Bhatnagar and M. P. Srivasta, “Heat transfer in plane Couette flow of a rarefied gas using Bhatnagar-Gross-Krook model,” *Phys. Fluids*. **12**, 938 (1969).

- [87] S. Ueno, “Probabilistic approach for rarefied-gas dynamics-linearized Couette flow,” *Appl. Math. Comput.* **69**, 61–73 (1995).
- [88] J. Lopez-Lemus and R. Velasco, “Slip boundary conditions in Couette flow,” *Physica A* **274**, 454–465 (1999).
- [89] W. Marques Jr, G. M. Kremer, and F. M. Sharipov, “Couette flow with slip and jump boundary conditions,” *Continuum Mech. Thermodyn.* **12**, 379–386 (2000).
- [90] W. Marques Jr and G. M. Kremer, “Couette flow from a thirteen field theory with slip and jump boundary conditions,” *Continuum Mech. Thermodyn.* **13**, 207–217 (2001).
- [91] C. E. Siewert, “Poiseuille, thermal creep and Couette flow: results based on the CES model for the linearized Boltzmann equation,” *Eur. J. Mech. B / Fluids* **21**, 579–597 (2002).
- [92] P. Taheri, M. Torrilhon, and H. Struchtrup, “Couette and Poiseuille microflows: analytical solutions for regularized 13-moment equations,” *Phys. Fluids* **21**, 017102 (2009).
- [93] Y. Onishi, “On the behavior of a slightly rarefied gas mixture over plane boundaries,” *Z. Angew. Math. Phys. (ZAMP)* **37**, 573–596 (1986).
- [94] D. Valougeorgis, “Couette flow of a binary gas mixture,” *Phys. Fluids* **31**, 521–524 (1988).
- [95] C. E. Siewert, “Couette flow for a binary gas mixture,” *J. Quant. Spectr. Rad. Tran.* **70**, 321–332 (2001).
- [96] B. B. Hamel, “Kinetic model for binary gas mixture,” *Phys. Fluids* **8**, 418–425 (1965).

- [97] F. Sharipov, L. M. G. Cumin, and D. Kalempa, “Plane Couette flow of binary gaseous mixture in the whole range of the Knudsen number,” *Eur. J. Mech. B/Fluids* **23**, 899–906 (2004).
- [98] H. L. Agrawal, R. Nath, and R. P. Singh, “Heat transfer in unsteady MHD Couette flow of an electrically conducting, viscous, incompressible rarefied gas,” *Astrophysics and Space Science* **129**, 169–180 (1987).
- [99] C. Cercignani and S. Cortese, “Validation of a Monte Carlo simulation of the plane Couette flow of a rarefied gas,” *J.Stat.Phys.* **75**, 817–838 (1994).
- [100] V. G. Chernyak and A. P. Polikarpov, “Nonlinear effects in gases in the Couette problem,” *J. Exp. Theor. Phys.* **110**, 147–156 (2010).
- [101] A. A. Abramov and A. Butkovskii, “Couette Flow Regimes with Heat Transfer in Rarefied Gas,” *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **116**, 1036–1042 (2013).
- [102] I. N. Larina and V. A. Rykov, “Numerical study of Couette flow based on a nonlinear nonequilibrium kinetic model of the Boltzmann equation for monatomic gases,” *Comput. Math. Math. Phys.* **54**, 696–705 (2014).
- [103] K. Koura, “Transient Couette Flow of Rarefied Binary Gas Mixtures,” *Phys. Fluids* **13**, 1457–1466 (1970).
- [104] C. Cercignani and F. Sharipov, “Gaseous mixture slit flow at intermediate Knudsen numbers,” *Phys. Fluids A* **4**, 1283–1289 (1992).
- [105] F. Sharipov, “Non-isothermal rarefied gas flow through a slit,” *Phys. Fluids* **9**, 1804–1810 (1997).
- [106] M. Hasegawa and Y. Sone, “Rarefied gas flow through a slit,” *Phys. Fluids A* **3**, 466–477 (1991).

- [107] V. D. Akinshin, V. D. Seleznev, and F. M. Sharipov, “Non-isothermal rarefied gas flow through a narrow slit,” *Izvestia Akademii Nauk SSSR, Mekhanika Zhidkosti i Gaza* **4**, 171–175 (1990), [in Russian]. Translated in *Fluid Dynamics* **25**(4), 642–645 (1990).
- [108] F. Sharipov and V. Seleznev, “Rarefied gas flow through a long tube at any pressure ratio,” *J. Vac. Sci. Technol. A* **12**, 2933–2935 (1994).
- [109] F. Sharipov, “Rarefied gas flow through a long tube at arbitrary pressure and temperature drops,” *J. Vac. Sci. Technol. A* **15**, 2434–2436 (1997).
- [110] F. Sharipov and D. Kalempa, “Gaseous mixture flow through a long tube at arbitrary Knudsen number,” *J. Vac. Sci. Technol. A* **20**, 814–822 (2002).
- [111] F. Sharipov, “Application of the Cercignani-Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. III. Poiseuille flow and thermal creep through a long tube,” *Eur. J. Mech. B / Fluids* **22**, 145–154 (2003).
- [112] F. Sharipov and G. Bertoldo, “Rarefied gas flow through a long tube of variable radius,” *J. Vac. Sci. Technol. A* **23**, 531–533 (2005).
- [113] S. T. Barashkin, B. T. Porodnov, and M. F. Chemagin, “Experimental investigation of flows and direction diagrams for outflow of gas into vacuum through capillaries of various lengths,” *Zhurnal Prikladnoj Mekhaniki i Tekhnicheskoy Fiziki* **4**, 74–80 (1977), [in Russian].
- [114] S. Dushman, *Scientific Foundation of Vacuum Technique* (John Wiley & Sons, Inc, New York, 1962), 2 edn.
- [115] A. Roth, *Vacuum Technology* (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1976).

- [116] O. Aktas, N. R. Aluru, and U. Ravaioli, “Application of a parallel DSMC technique to predict flow characteristics in microfluidic filters,” *J. Microelectromechanical Systems* **10**, 538–549 (2001).
- [117] G. D. Danilatos, “Direct simulation Monte Carlo study of orifice flow,” in *Rarefied Gas Dynamics*, B. T. J and M. A. Gallis, eds., pp. 924–932 (2001).
- [118] G. D. Danilatos, M. R. Phillips, and J. V. Nailon, “Electron beam current loss at the high-vacuum-high-pressure boundary in the environmental scanning electron microscope,” *Microscopy & Microanalysis* **7**, 397–406 (2001).
- [119] A. J. Jamison, A. D. Ketsdever, and E. P. Muntz, “Gas dynamic calibration of a nano-Newton thrust stand,” *Rev. Sci. Instruments* **73**, 3629–3637 (2002).
- [120] P. Szwemin, K. Szymański, and K. Jousten, “Monte Carlo study of a new PTB primary standard for very low pressure,” *Metrologia* **36**, 562–564 (1999).
- [121] W. Jitschin, U. Weber, and H. K. Hartmann, “Convenient primary gas flow meter,” *Vacuum* **46**, 821–824 (1995).
- [122] W. Jitschin, M. Ronzheimer, and S. Khodabakhshi, “Gas flow measurement by means of orifices and Venturi tubes,” *Vacuum* **53**, 181–185 (1999).
- [123] F. Sharipov and V. Seleznev, “Data on internal rarefied gas flows,” *J. Phys. Chem. Ref. Data* **27**, 657–706 (1998).
- [124] F. Sharipov, “Rarefied gas flow into vacuum through a thin orifice. Influence of the boundary conditions,” *AIAA Journal* **40**, 2006–2008 (2002).



- [125] F. Sharipov, “Numerical simulation of rarefied gas flow through a thin orifice,” *J. Fluid Mech.* **518**, 35–60 (2004).
- [126] H. W. Liepmann, “Gas kinetics and gas dynamics of orifice flow,” *J. Fluid Mech.* **10**, 65–79 (1961).
- [127] R. Narasimha, “Orifice flow of high Knudsen numbers,” *J. Fluid Mech.* **10**, 371–384 (1961).
- [128] D. R. Willis, “Mass flow through a circular orifice and a two-dimensional slit at high Knudsen numbers,” *J. Fluid Mech.* **21**, 21–31 (1965).
- [129] A. Rotenberg and H. Weitzner, “Nearly free flow through an orifice,” *Phys. Fluid.* **12**, 1573–1581 (1969).
- [130] E. M. Shakhov, “Solution of axisimmetrical problems of the rarefied gas theory by the method of finite differences.” *Zhurnal Vychislitel'noj Matematiki i Matemachaskoj Fizicheski* **14**, 970–981 (1974), [in Russian].
- [131] G. M. Alder, “The numerical solution of choked and supercritical ideal gas flow through orifices and convergent conical nozzles,” *J. Mech. Eng. Sci.* **21**, 197–203 (1979).
- [132] R. Roscoe, “The flow of viscous fluid round plane obstacles,” *Philos. Mag.* **40**, 338–351 (1949).
- [133] H. Hasimoto, “On the flow of a viscous fluid past a thin screen at small Reynolds numbers,” *J. Phys. Soc. Japan* **13**, 633–639 (1958).
- [134] J. A. J. Perry, “Critical flow through sharp-edged orifices,” *Trans. ASME* **71**, 757–764 (1949).
- [135] H. R. Linden and D. F. Othmer, “Air flow through small orifices in the viscous region,” *Trans. ASME* **71**, 765–772 (1949).

- [136] A. K. Sreekanth, “Transition flow through short circular tubes,” *Phys. Fluids* **8**, 1951–1956 (1965).
- [137] S. F. Borisov, I. G. Neudachin, B. T. Porodnov, and P. E. Suetin, “Flow of rarefied gases through an orifice for small pressure drop,” *Zhurnal Tekhnicheskoy Fiziki* **43**, 1735–1739 (1973), [in Russian].
- [138] B. T. Porodnov, P. E. Suetin, S. F. Borisov, and V. D. Akinshin, “Experimental investigation of rarefied gas flow in different channels,” *J. Fluid Mech.* **64**, 417–437 (1974).
- [139] T. Fujimoto and M. Usami, “Rarefied gas flow through a circular orifice and short tubes,” *J. Fluids Eng.-Tran. ASME* **106**, 367–373 (1984).
- [140] F. Sharipov, “Rarefied gas flow through a thin orifice,” in *Rarefied Gas Dynamics*, T. J. Bartel and M. A. Gallis, eds., **585**, 494–501 (2001).
- [141] A. A. Alexeenko, S. F. Gimelshein, D. Levin, A. D. Ketsdever, and M. S. Ivanov, “Study of orifice flow in the transitional regime,” in *Rarefied Gas Dynamics*, A. D. Ketsdever and E. Muntz, eds., **663**, 565–571 (2003), 23rd International Symposium on Rarefied Gas Dynamics Rarefied Gas Dynamics, Whistler, Canada, JUL 20-25, 2002.
- [142] F. Sharipov, “Rarefied gas flow through an orifice at finite pressure ratio,” in *Rarefied Gas Dynamics*, A. Ketsdever and E. P. Muntz, eds., **663**, 1049–1056 (2003).
- [143] S. F. Gimelshein, G. N. Markelov, T. C. Lilly, N. P. Selden, and A. D. Ketsdever, “Experimental and numerical modeling of rarefied gas flows through orifices and short tubes,” in *Rarefied Gas Dynamics*, M. Capitelli, ed., pp. 437–443 (2004).
- [144] S. Varoutis, D. Valougeorgis, O. Sazhin, and F. Sharipov, “Rarefied gas flow through short tubes into vacuum,” *J. Vac. Sci. Technol. A* **26**, 228–238 (2008).

- [145] F. Sharipov, “Transient flow of rarefied gas through an orifice,” J. Vac. Sci. Technol. A **30**, 021 602 (2012).
- [146] J. A. Fedchak and D. R. Defibaugh, “Accurate conductance measurements of a pinhole orifice using a constant-pressure flowmeter,” Measurement **45**, 2449–2451 (2012).
- [147] S. Misdanitis, S. Pantazis, and D. Valougeorgis, “Pressure driven rarefied gas flow through a slit and an orifice,” Vacuum **86**, 1701–1708 (2012).
- [148] M. T. Ho and I. Graur, “Numerical study of unsteady rarefied gas flow through an orifice,” Vacuum **109**, 253–265 (2014).
- [149] M. Vargas, S. Naris, D. Valougeorgis, Pantazis, and K. Jousten, “Time-dependent rarefied gas flow of single gases and binary gas mixtures into vacuum,” Vacuum **109**, 385–396 (2014).
- [150] S. Pantazis and H. Rusche, “A hybrid continuum-particle solver for unsteady rarefied gas flows,” Vacuum **109**, 275–283 (2014).
- [151] F. Sharipov, “Benchmark problems in rarefied gas dynamics,” Vacuum **86 SI**, 1697–1700 (2012).
- [152] S. T. Barashkin, B. T. Porodnov, and P. E. Suetin, “Outflow of gas into vacuum through an orifice,” Zhurnal Tekhnicheskoy Fiziki **47**, 199–202 (1977), [in Russian].
- [153] R. Eckhardt, “Stan Ulam, John von Neumann, and the Monte Carlo method,” Los Alamos Science **15, SI**, 131137 (1987).
- [154] G. A. Bird, *The DSMC method* (2013).
- [155] G. A. Bird, “Direct Simulation and the Boltzmann Equation,” Phys. Fluids **13**, 2676–2681 (1970).

- [156] W. Wagner, “A convergence proof for Bird’s direct simulation Monte Carlo method for the Boltzmann equation,” *J. Stat. Phys.* **66**, 1011–1044 (1992).
- [157] M. S. Ivanov, S. F. Gimelshein, and A. E. Beylich, “Hysteresis effect in stationary reflection of shock waves,” *Phys. Fluids* **7**, 685–687 (1995).
- [158] M. S. Ivanov and S. F. Gimelshein, “Computational hypersonic rarefied flows,” *Annu. Rev. Fluid Mech.* **30**, 469–505 (1998).
- [159] F. Sharipov, “Data on the velocity slip and temperature jump on a gas-solid interface,” *J. Phys. Chem. Ref. Data* **40**, 023 101 (2011).
- [160] S. K. Loyalka, “Slip and jump coefficients for rarefied gas flows: variational results for Lennard-Jones and  $n(r)$ -6 potential,” *Physica A* **163**, 813–821 (1990).
- [161] C. E. Siewert, “The linearized Boltzmann equation: A concise and accurate solution of the temperature-jump problem,” *J. Quant. Spec. Rad. Tran* **77**, 417–432 (2003).
- [162] M. Wakabayashi, T. Ohwada, and F. Golse, “Numerical analysis of the shear and thermal creep flows of a rarefied gas over the plane wall of a Maxwell-type boundary on the basis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules,” *Eur. J. Mech. and B/Fluids* **15**, 175–201 (1996).
- [163] V. J. Benites, *Cálculo de coeficientes de transporte com base no potencial ab initio*, Master’s thesis, Universidade Federal do Paraná, Programa de Pós-graduação em Física (2015).
- [164] F. Sharipov and D. Kalempa, “Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. I. Viscous slip coefficient,” *Phys. Fluids* **15**, 1800–1806 (2003).

- [165] F. Sharipov and D. Kalempa, “Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. IV. Temperature jump coefficient,” *Int. J. Heat Mass Transfer* **48**, 1076–1083 (2005).
- [166] C. L. Pekeris and Z. Alterman, “Solution of the Boltzmann-Hilbert integral equation. II. The coefficients of viscosity and heat conduction,” *Proc. Natl. Acad. Sci.* **43**, 998–1007 (1957).
- [167] F. Sharipov, “Rarefied gas flow through a slit: Influence of the gas-surface interaction,” *Phys. Fluids* **8**, 262–268 (1996).
- [168] V. V. Aristov, A. A. Frolova, S. A. Zabelok, R. R. Arslanbekov, and V. I. Kolobov, “Simulations of pressure-driven flows through channels and pipes with unified flow solver,” *Vacuum* **86 SI**, 1717–1724 (2012).
- [169] O. I. Rovenskaya, A. P. Polikarpov, and I. A. Graur, “Comparison of the numerical solutions of the full Boltzmann and S-model kinetic equations for gas flow through a slit,” *Comput. Fluids* **80**, 71–78 (2013).
- [170] F. Sharipov and D. V. Kozak, “Rarefied gas flow through a thin slit into vacuum simulated by the Monte Carlo method over the whole range of the Knudsen number,” *J. Vac. Sci. Technol. A* **27**, 479–484 (2009).
- [171] S. Varoutis, D. Valougeorgis, and F. Sharipov, “Simulation of gas flow through tubes of finite length over the whole range of rarefaction for various pressure drop ratios,” *J. Vac. Sci. Technol. A* **22**, 1377–1391 (2009).
- [172] F. Sharipov and D. V. Kozak, “Rarefied gas flow through a thin slit at an arbitrary pressure ratio,” *Eur. J. Mech. B/Fluids* **30**, 543–549 (2011).
- [173] T. C. Lilly, S. F. Gimelshein, A. D. Ketsdever, and G. N. Markelov, “Measurements and computations of mass flow and momentum flux

- through short tubes in rarefied gases,” *Phys. Fluids* **18**, 093601.1–11 (2006).
- [174] O. Sazhin, “Gas molecule-molecule interaction and the gas-surface scattering effect on the rarefied gas flow through a slit into a vacuum,” *J. Exp. Theor. Phys.* **108**, 874–879 (2009).
  - [175] O. Sazhin, “Rarefied Gas Flow through a Channel of Finite Length into a Vacuum,” *J. Exp. Theor. Phys.* **109**, 700–706 (2009).
  - [176] A. R. Janzen and R. A. Aziz, “An accurate potential energy curve for helium based on ab initio calculations,” *J. Chem. Phys.* **107**, 914–919 (1997).
  - [177] R. Hellmann, E. Bich, and E. Vogel, “Ab initio potential energy curve for the helium atom pair and thermophysical properties of dilute helium gas. I. Helium-helium interatomic potential,” *Mol. Phys.* **105**, 3013–3023 (2007).
  - [178] R. A. Aziz, “A highly accurate interatomic potential for argon,” *J. Chem. Phys.* **99**, 4518–4525 (1993).
  - [179] P. Slavíček, R. Kalus, P. Paška, I. Odvárková, P. Hobza, and A. Malijevský, “State-of-the-art correlated ab initio potential energy curves for heavy rare gas dimers: Ar<sub>2</sub>, Kr<sub>2</sub>, and Xe<sub>2</sub>,” *J. Chem. Phys.* **119**, 2102–2119 (2003).
  - [180] R. Hellmann, E. Bich, and E. Vogel, “Ab initio potential energy curve for the neon atom pair and thermophysical properties of the dilute neon gas. I. Neon-neon interatomic potential and rovibrational spectra,” *Mol. Phys.* **106**, 133–140 (2008).
  - [181] F. M. Tao, “Ab initio calculation of the interaction potential for the krypton dimer: The use of bond function basis sets,” *J. Chem. Phys.* **111**, 2407–2413 (1999).

- [182] T. P. Haley and S. M. Cybulski, “Ground state potential energy curves for He-Kr, Ne-Kr, Ar-Kr, and Kr<sub>2</sub>: Coupled-cluster calculations and comparison with experiment,” J. Chem. Phys. **119**, 5487–5496 (2003).

## Apêndice A

# Campos de escoamento de orifício

Neste apêndice apresentamos as distribuições espaciais (campos) de densidade numérica, temperatura adimensional e número de Mach local para o escoamento por orifício, usando o potencial *ab initio* para o gás argônio. Ambas as partições são mantidas a temperatura constante de 300 K. A partição se localiza na posição  $x = 0$  e a abertura do orifício se estende desde  $y = 0$  até  $y = 1$ , ou seja, considerando a parte simétrica de baixo (que não é mostrada) o diâmetro do orifício é igual a 2. Todas as distâncias são em unidades de raio do orifício. O cálculo do número de Mach local é feito considerando a velocidade do som num gás ideal calculada para a temperatura local, e não para a temperatura de equilíbrio de 300 K. Os gráficos com Número de Mach também apresentam linhas de escoamento. Podemos ver que para o regime hidrodinâmico ( $\delta = 100$ ), em todos os casos, o escoamento é supersônico e surgem ondas de choque que formam os chamados “discos de Mach” ou “anéis de Mach”. Tal fenômeno é discreto para os casos em que  $\delta = 10$  e praticamente inexistente nos de regime de transição ( $\delta \sim 1$ ). Vemos também que, como já era de se esperar, quanto maiores são as razões de pressão, maiores são os valores de número de Mach para o regime hidrodinâmico. Ou seja,  $p_1/p_0 = 0,1$  tem os maiores números de Mach, enquanto  $p_1/p_0 = 0,9$  tem os menores.



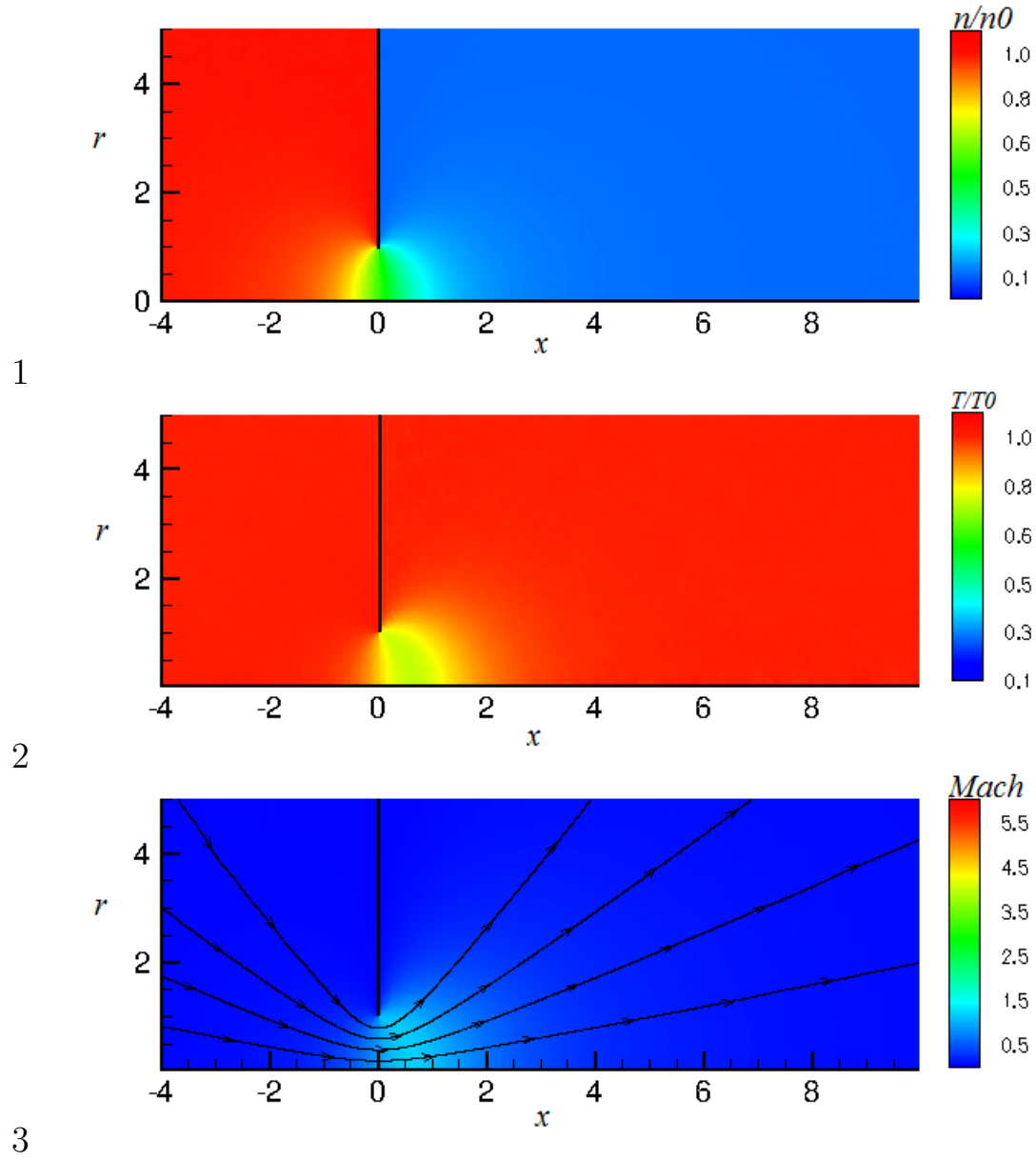


Figura A.1: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,1$  e  $\delta = 0,5$ .

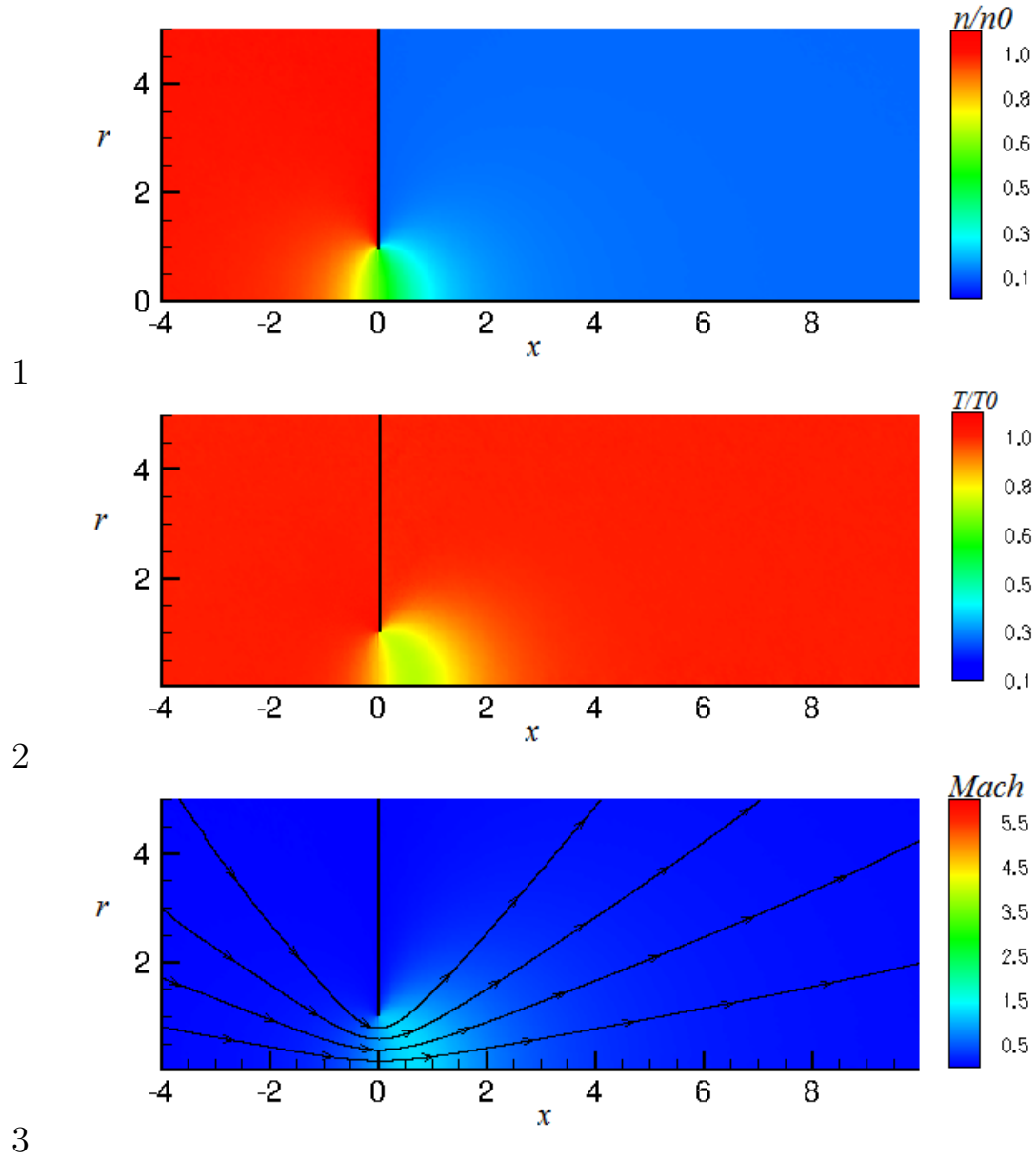


Figura A.2: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,1$  e  $\delta = 1$ .

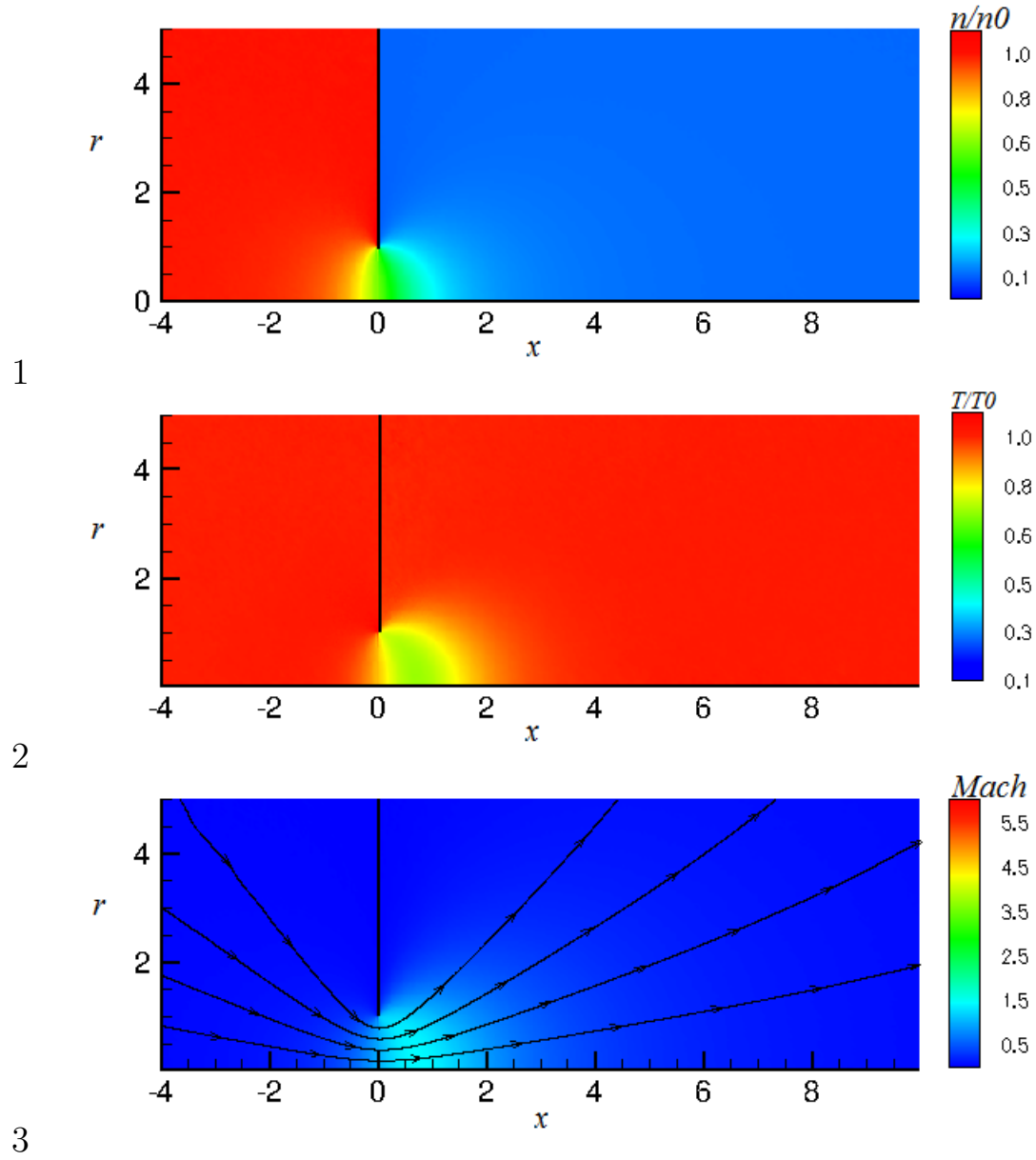


Figura A.3: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,1$  e  $\delta = 2$ .

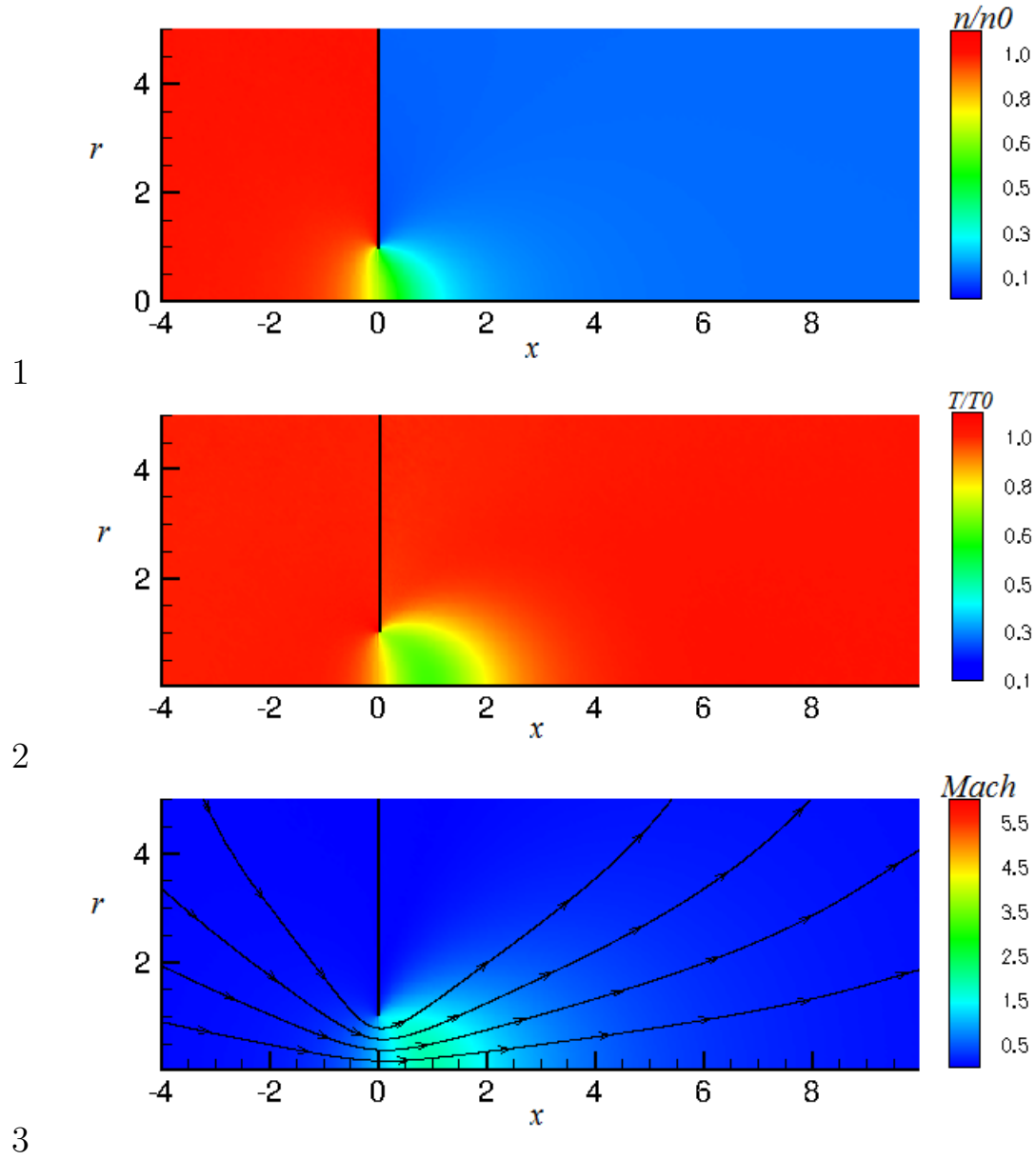


Figura A.4: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,1$  e  $\delta = 5$ .

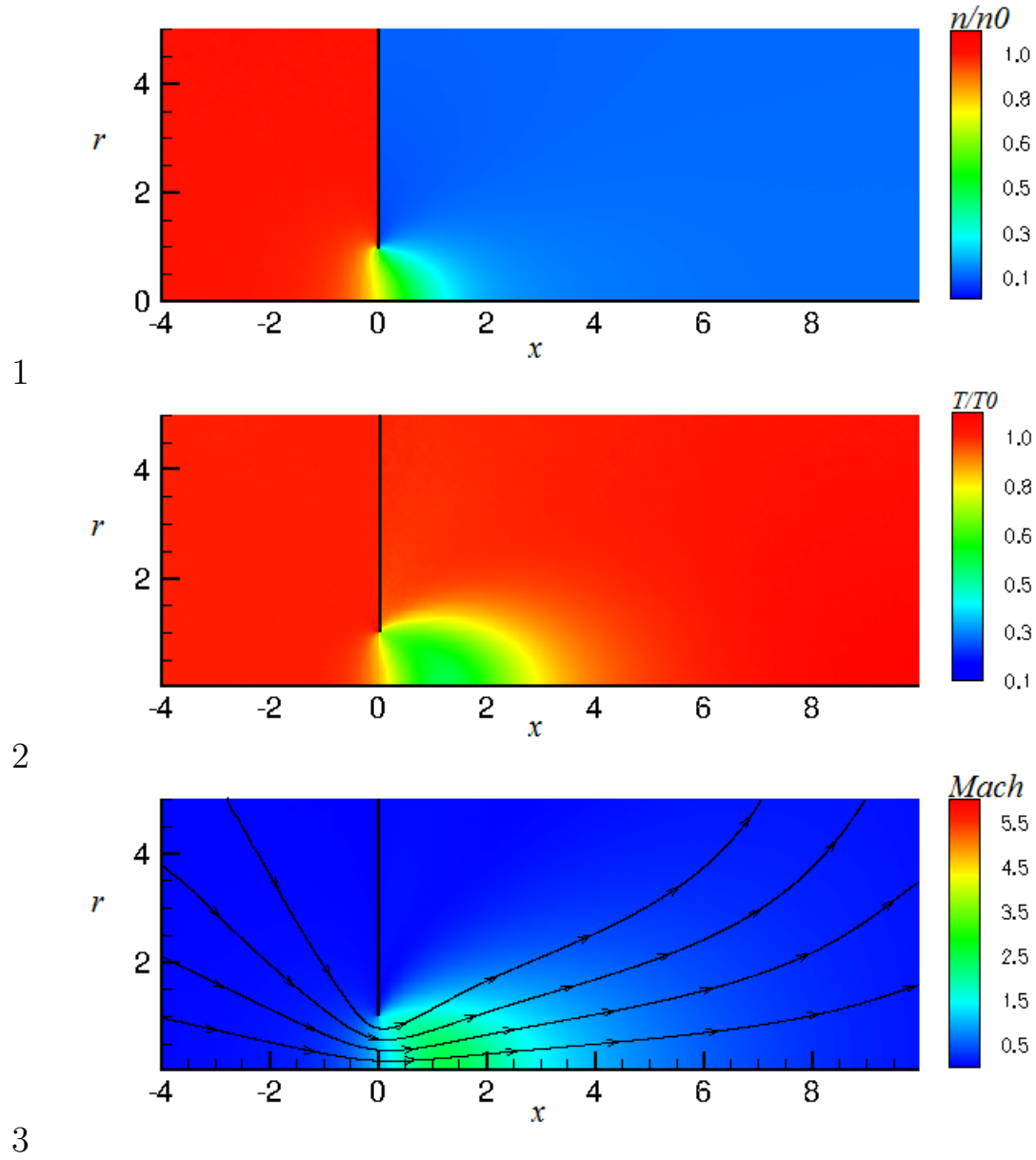


Figura A.5: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,1$  e  $\delta = 10$ .

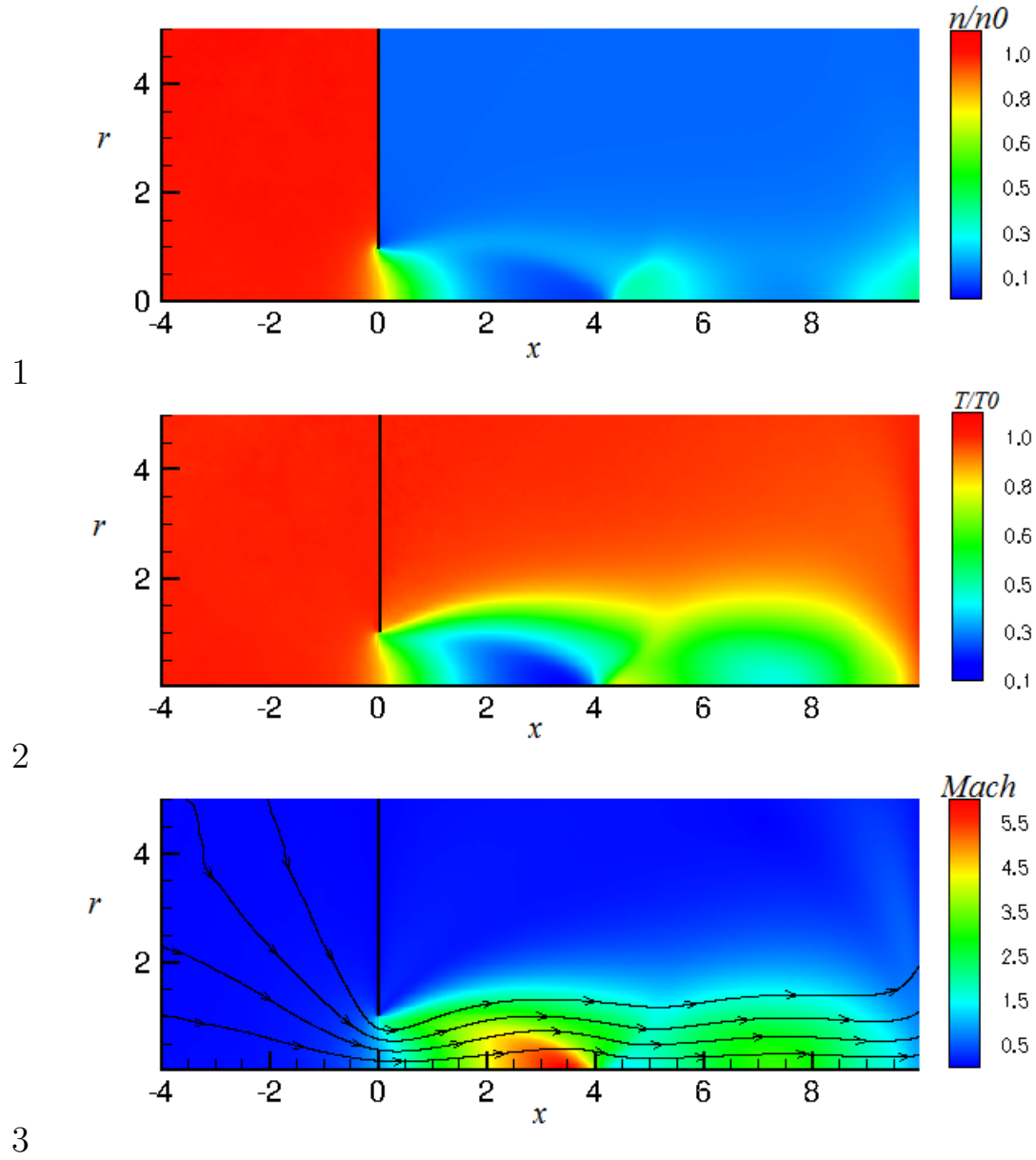


Figura A.6: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,1$  e  $\delta = 100$ .

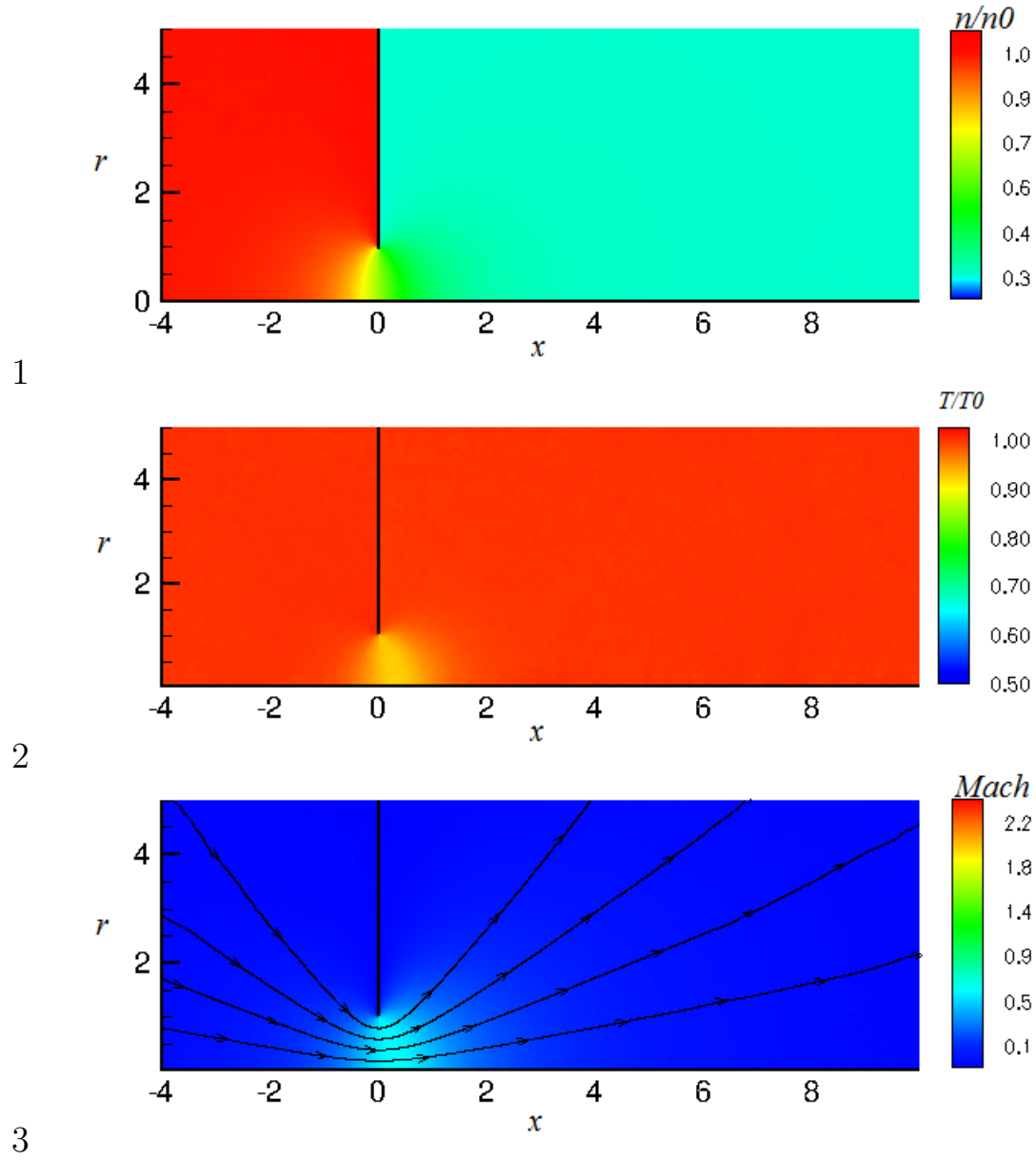


Figura A.7: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,3$  e  $\delta = 0,5$ .

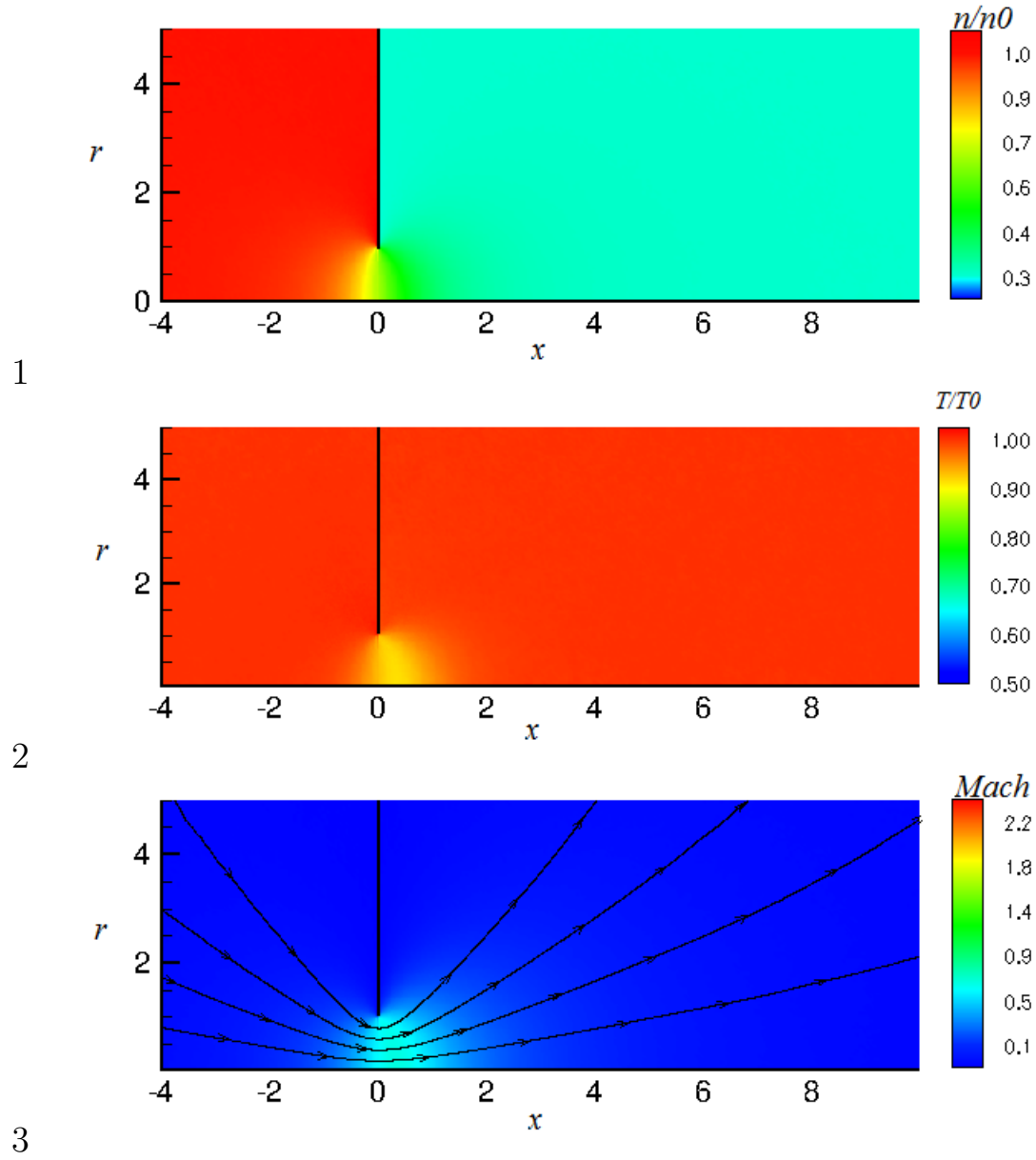


Figura A.8: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,3$  e  $\delta = 1$ .



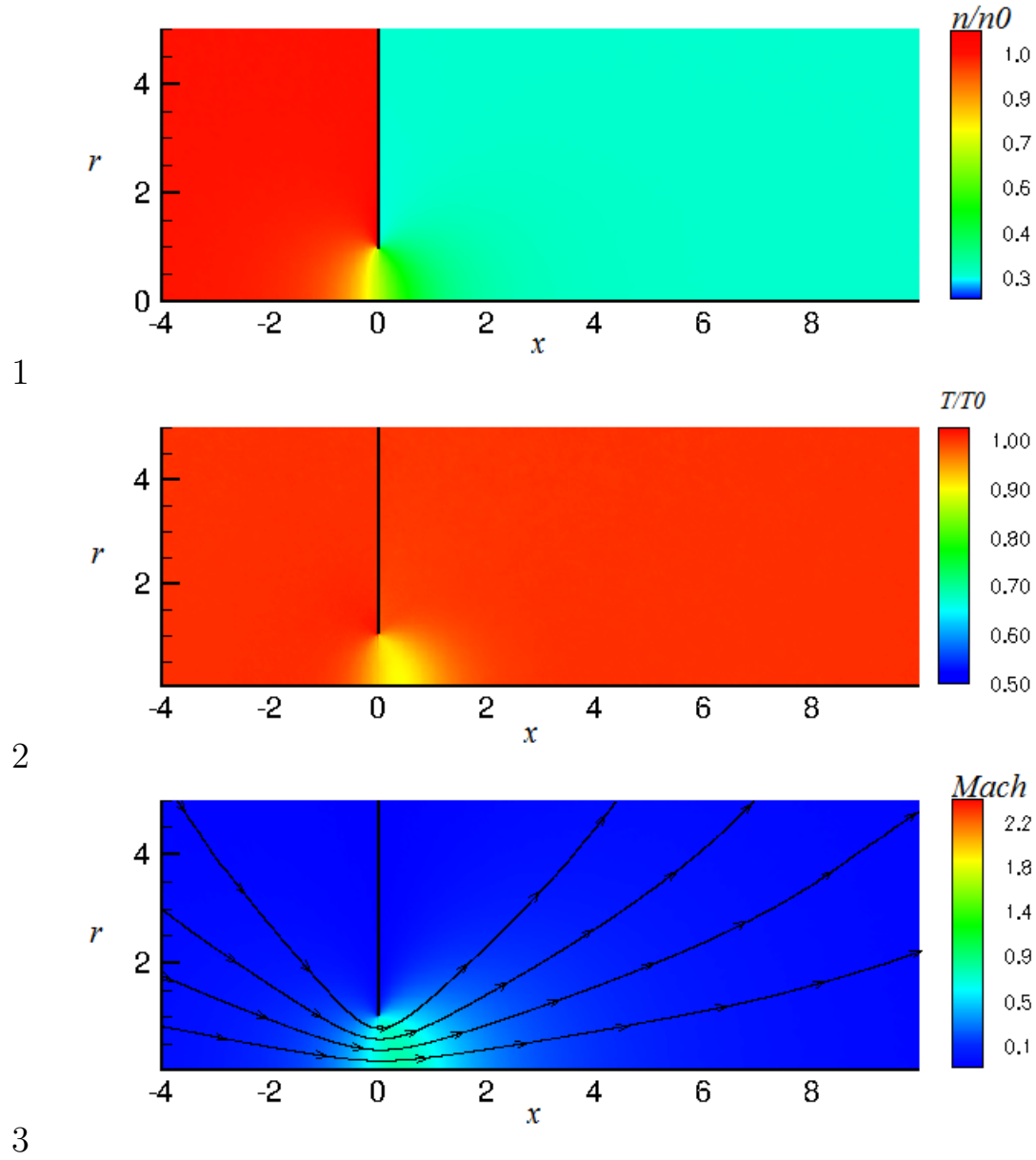


Figura A.9: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,3$  e  $\delta = 2$ .

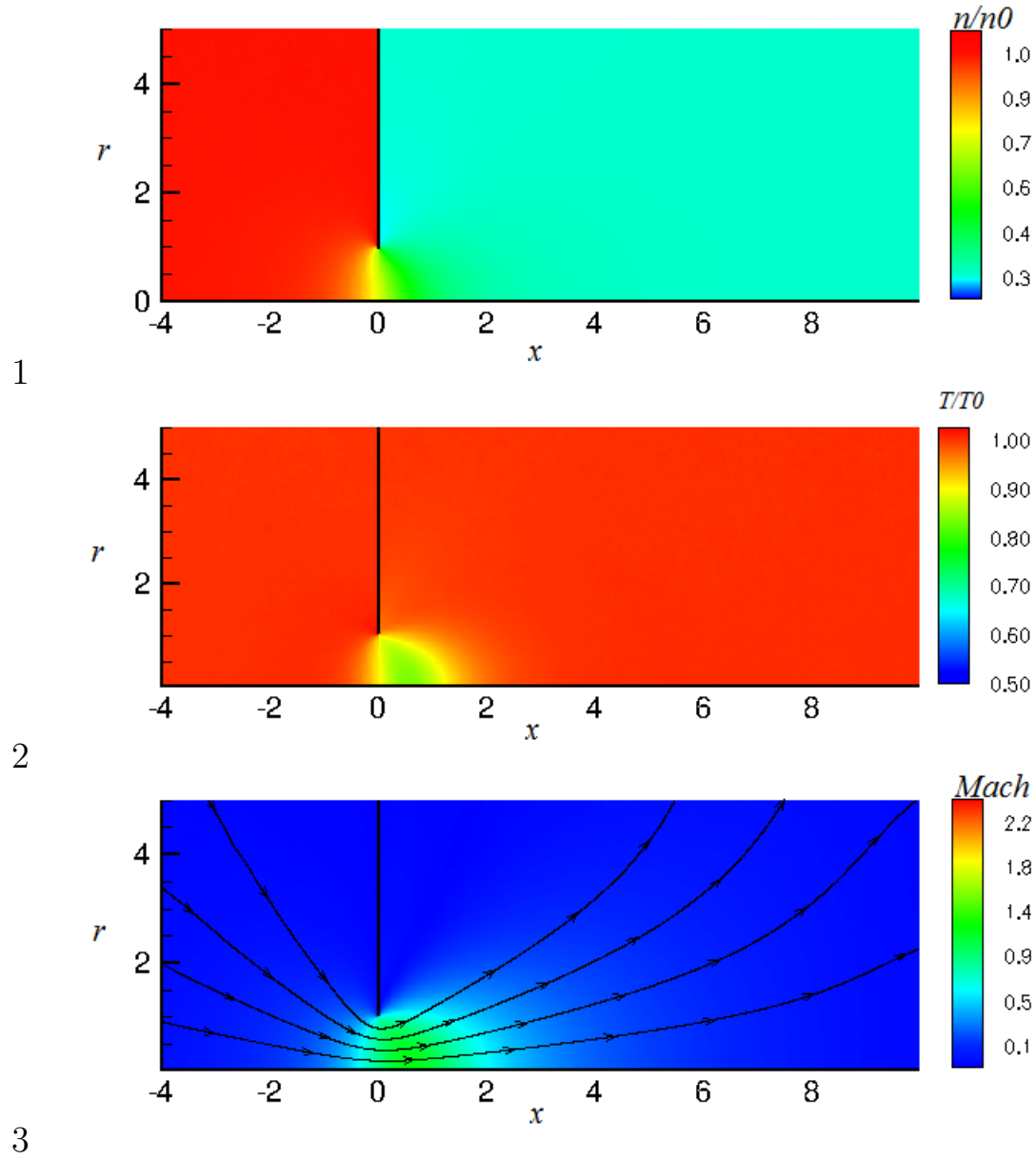


Figura A.10: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,3$  e  $\delta = 5$ .

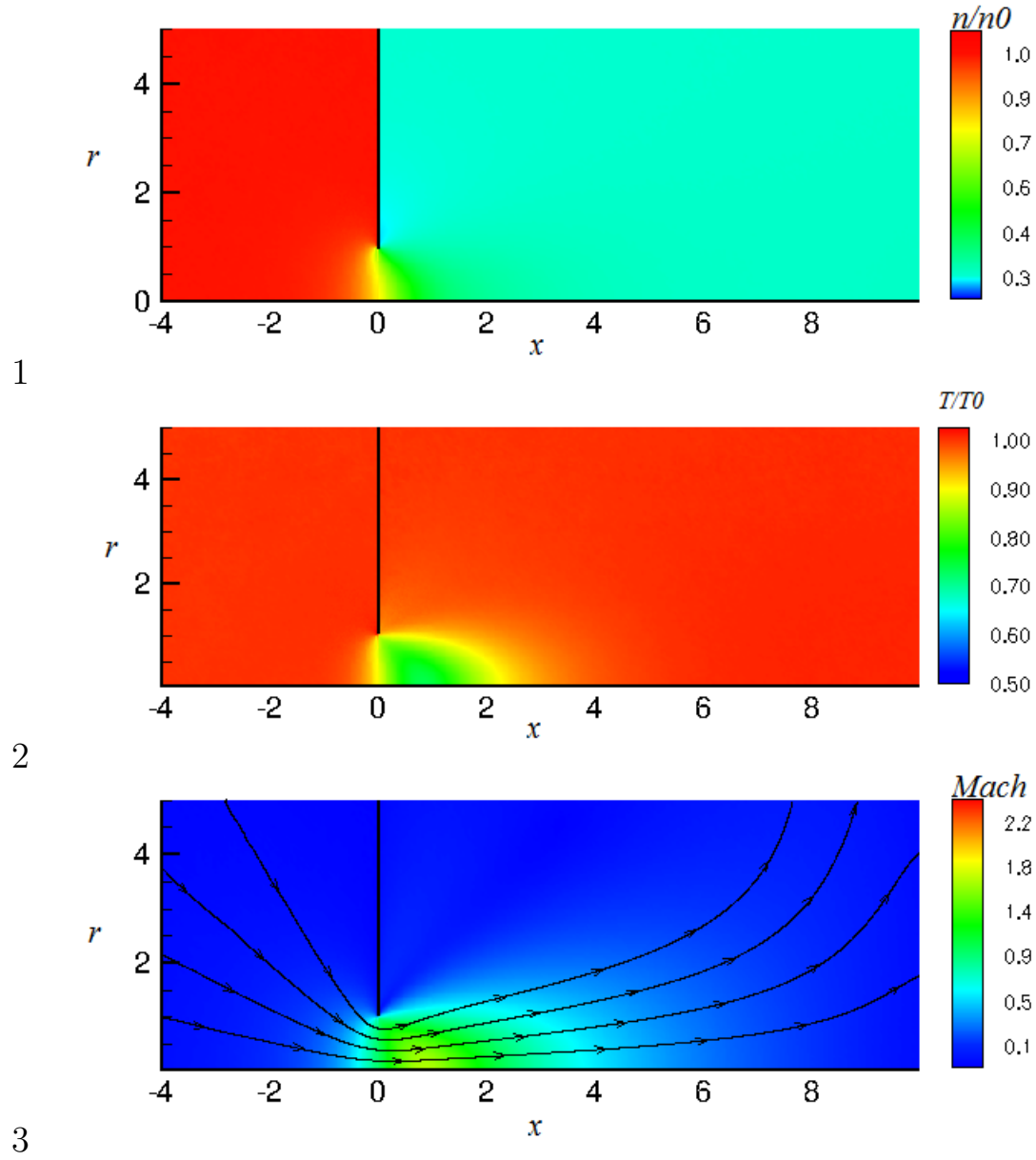


Figura A.11: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,3$  e  $\delta = 10$ .

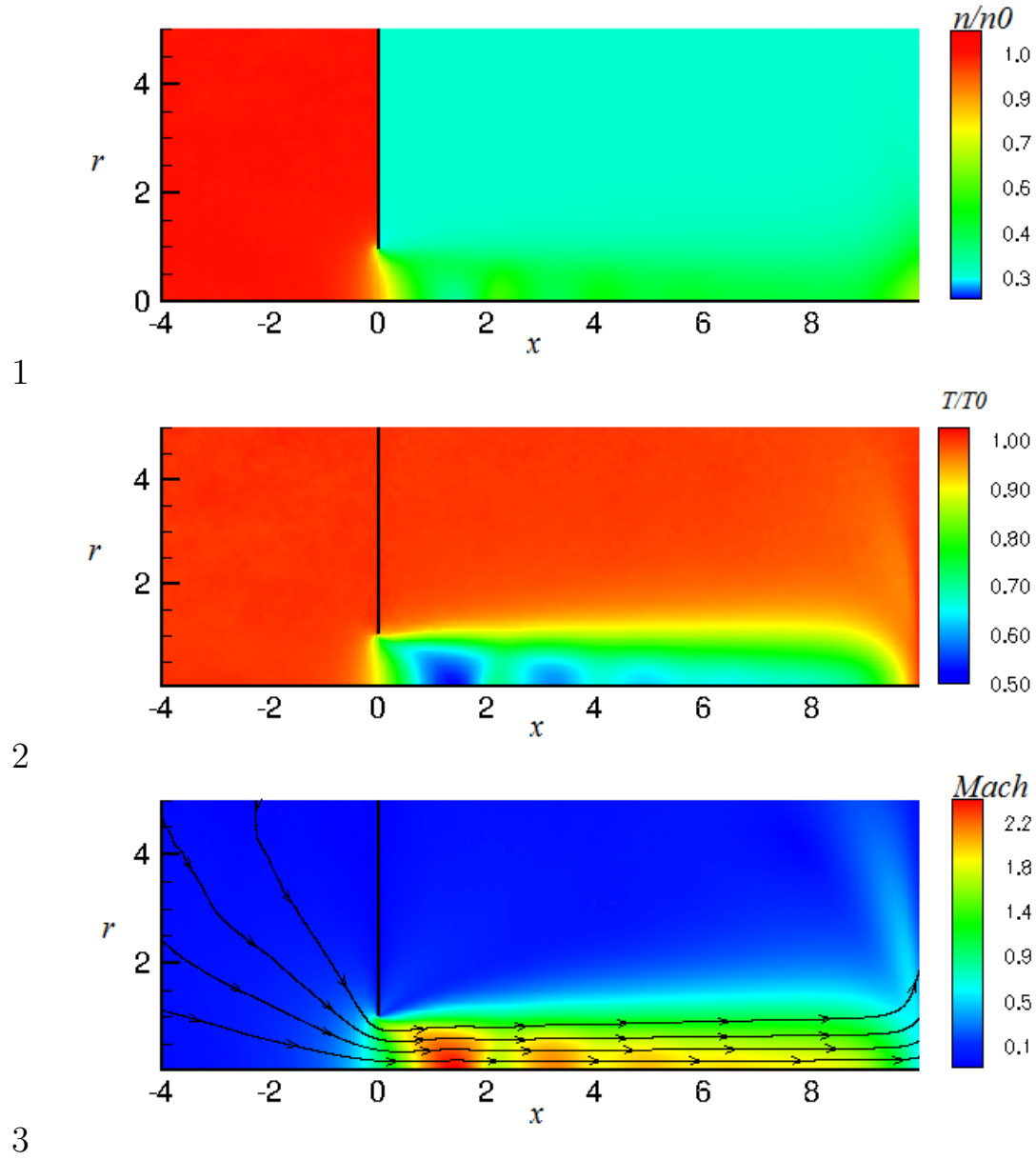


Figura A.12: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,3$  e  $\delta = 100$ .

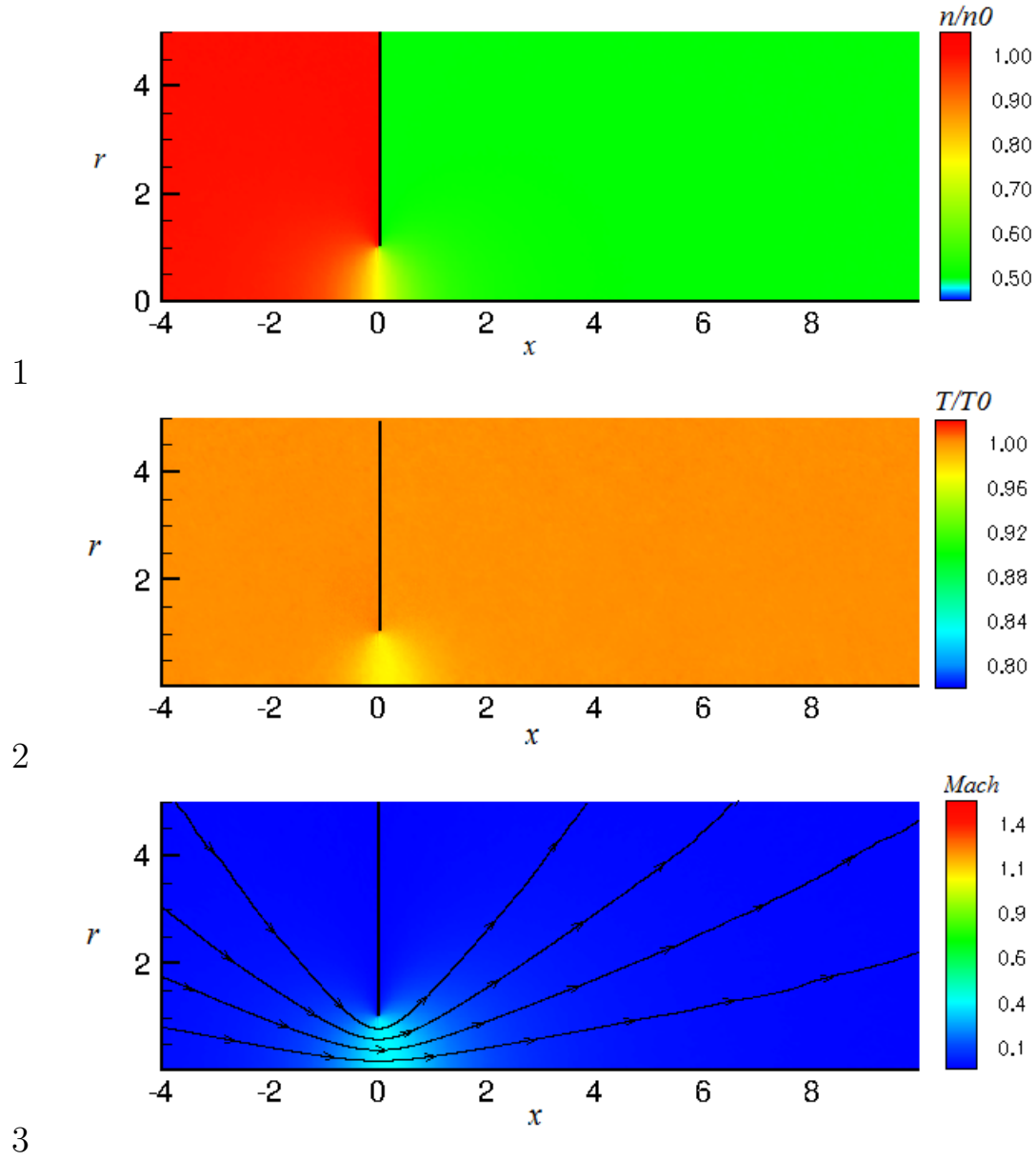


Figura A.13: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,5$  e  $\delta = 0,5$ .

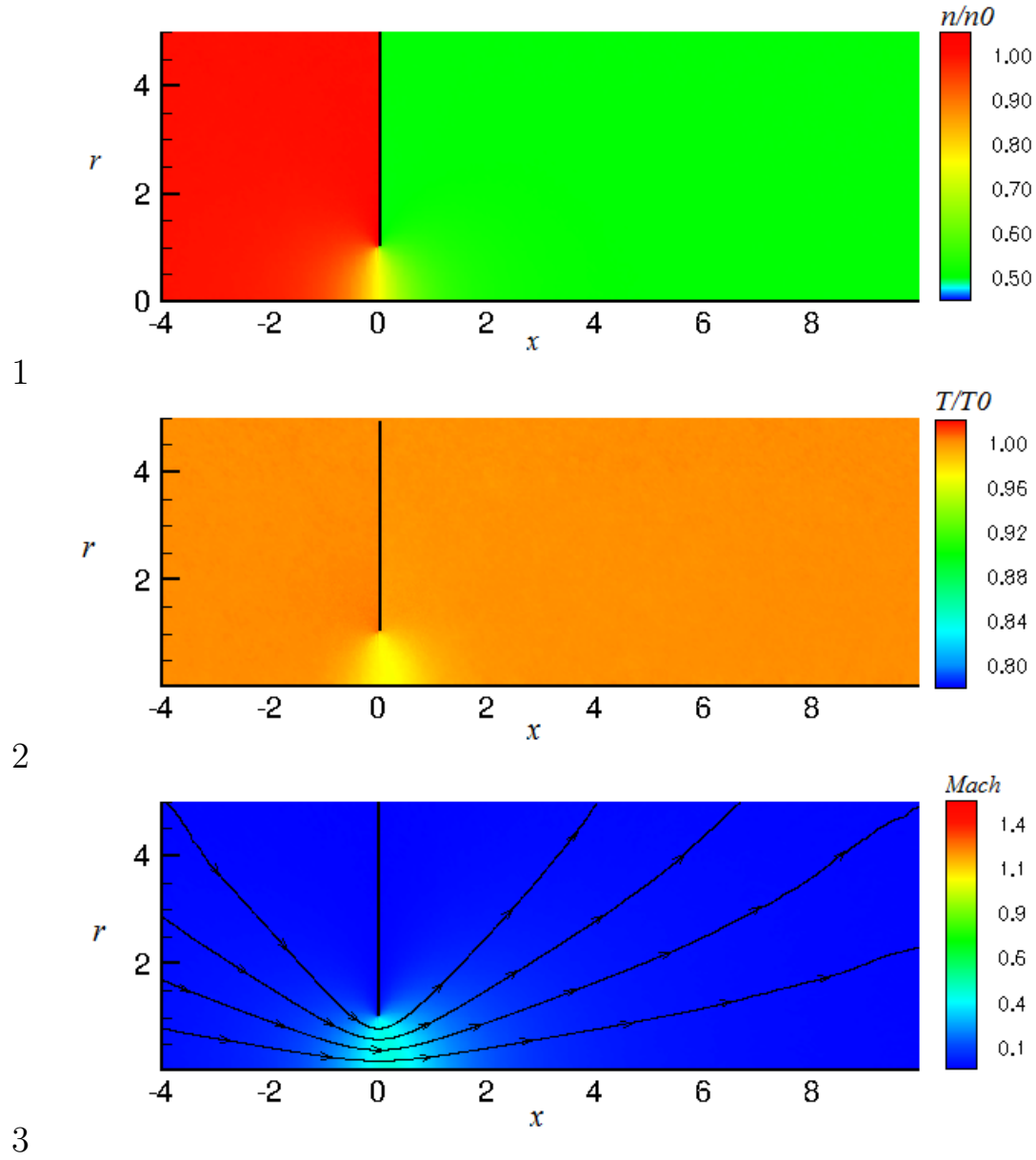


Figura A.14: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,5$  e  $\delta = 1$ .

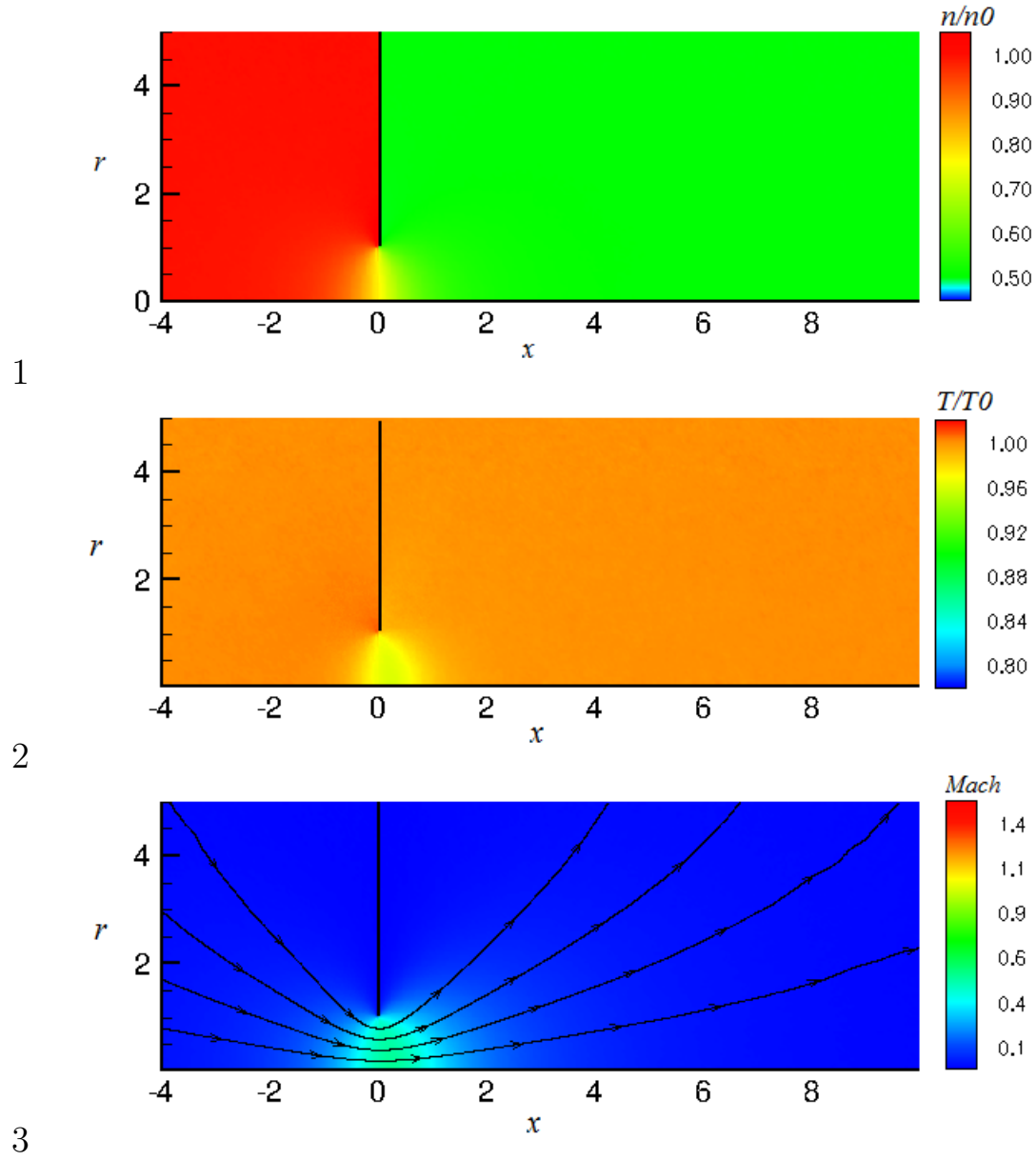


Figura A.15: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,5$  e  $\delta = 2$ .

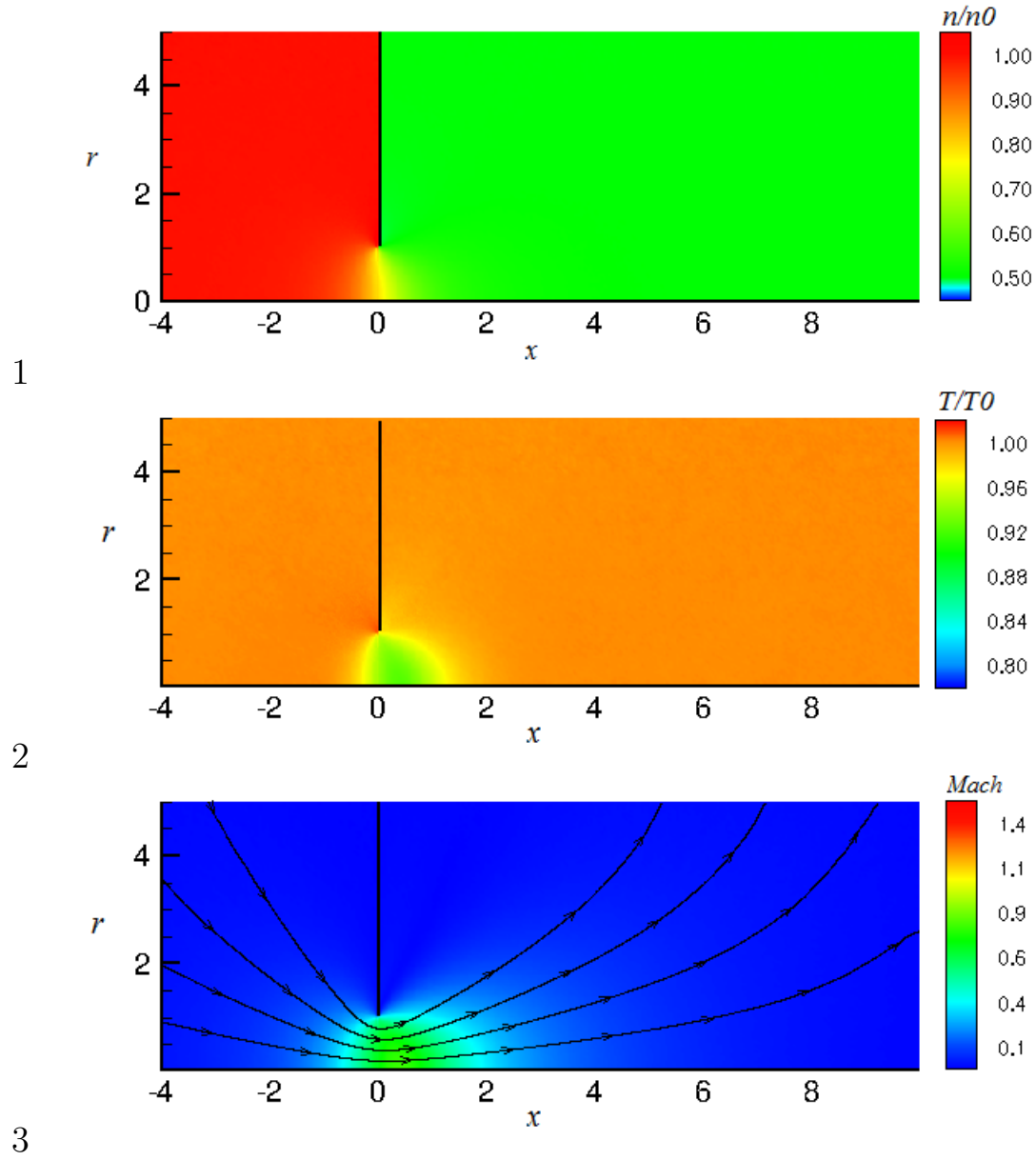


Figura A.16: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,5$  e  $\delta = 5$ .



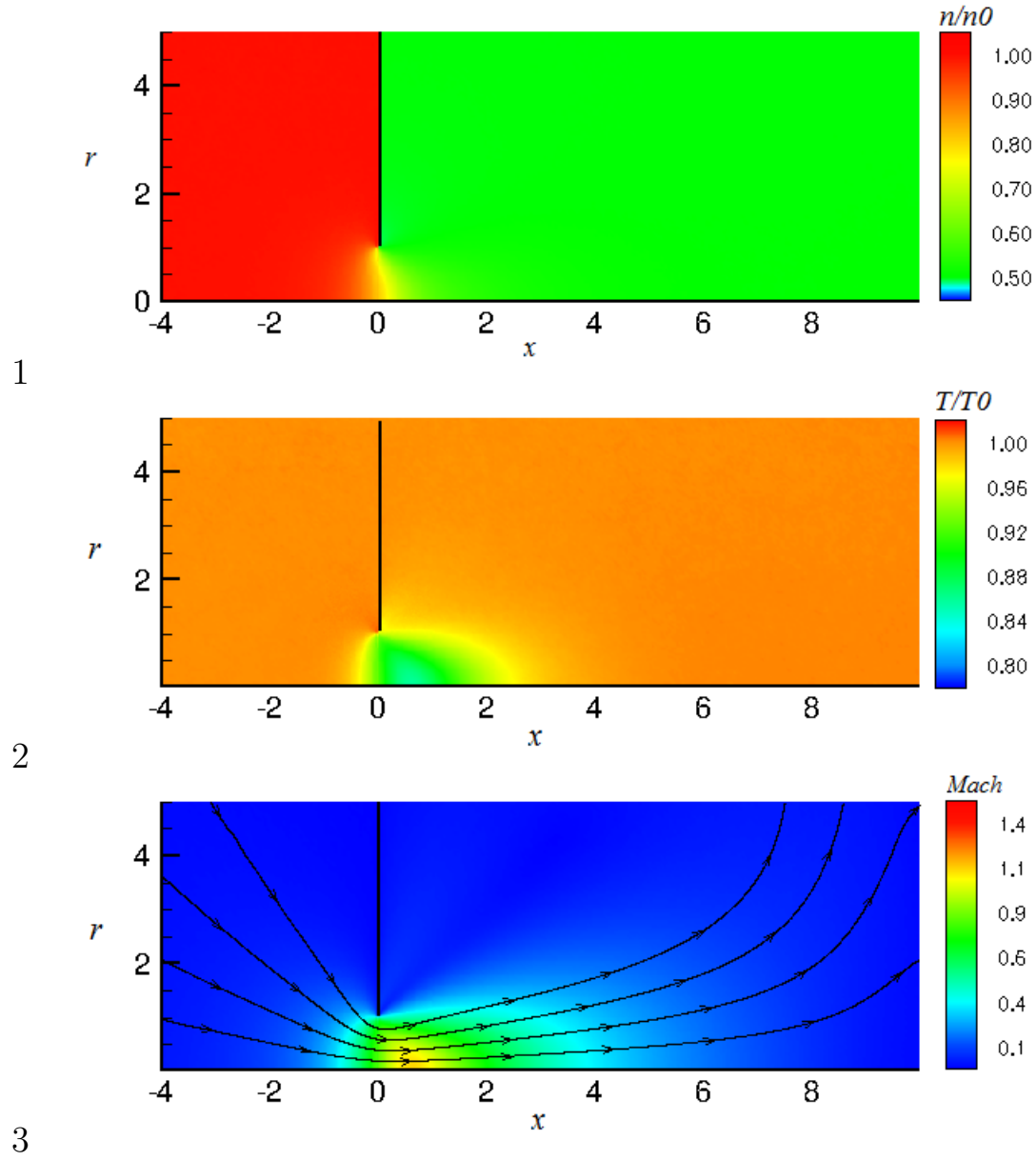


Figura A.17: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,5$  e  $\delta = 10$ .

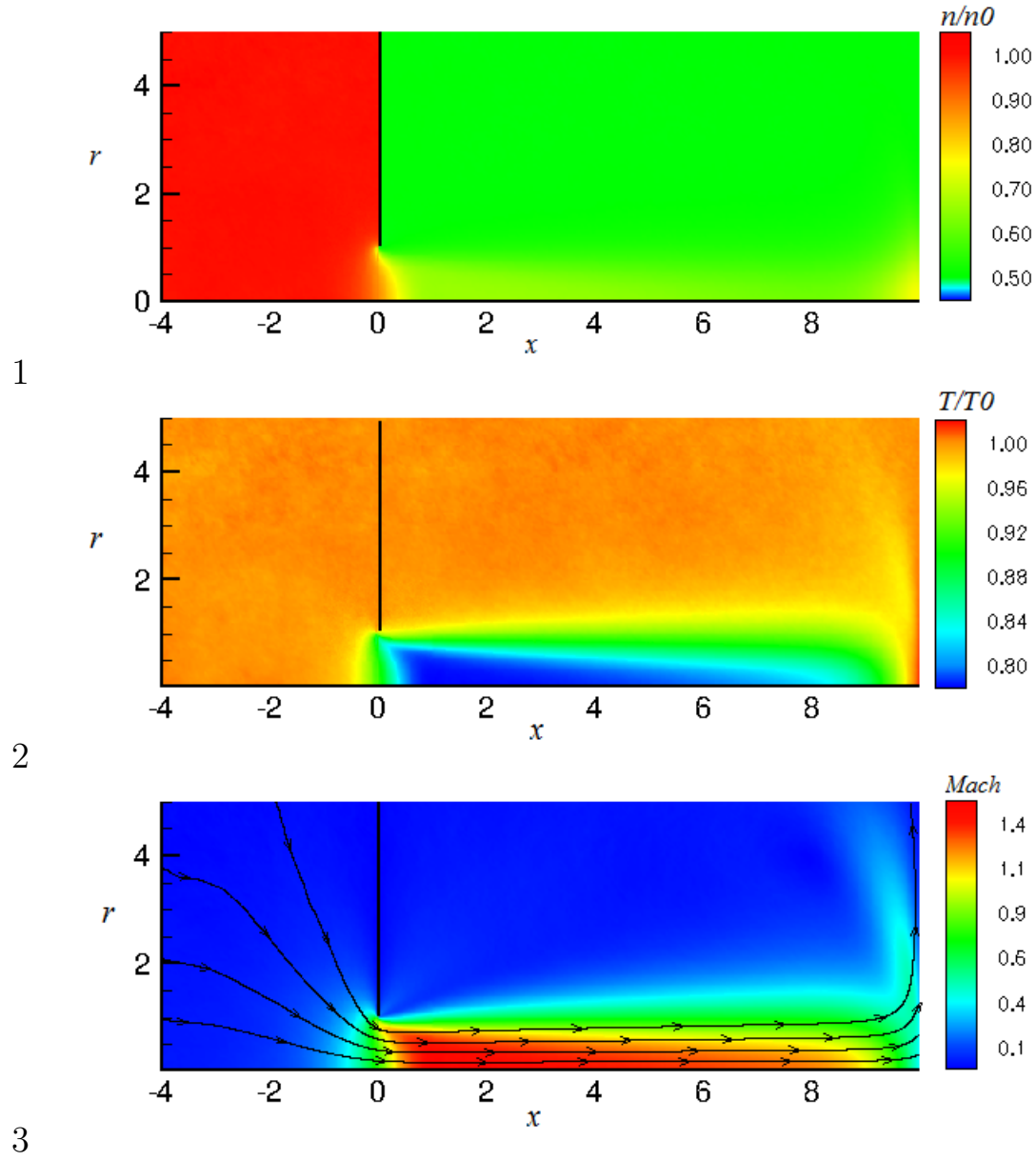


Figura A.18: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,5$  e  $\delta = 100$ .

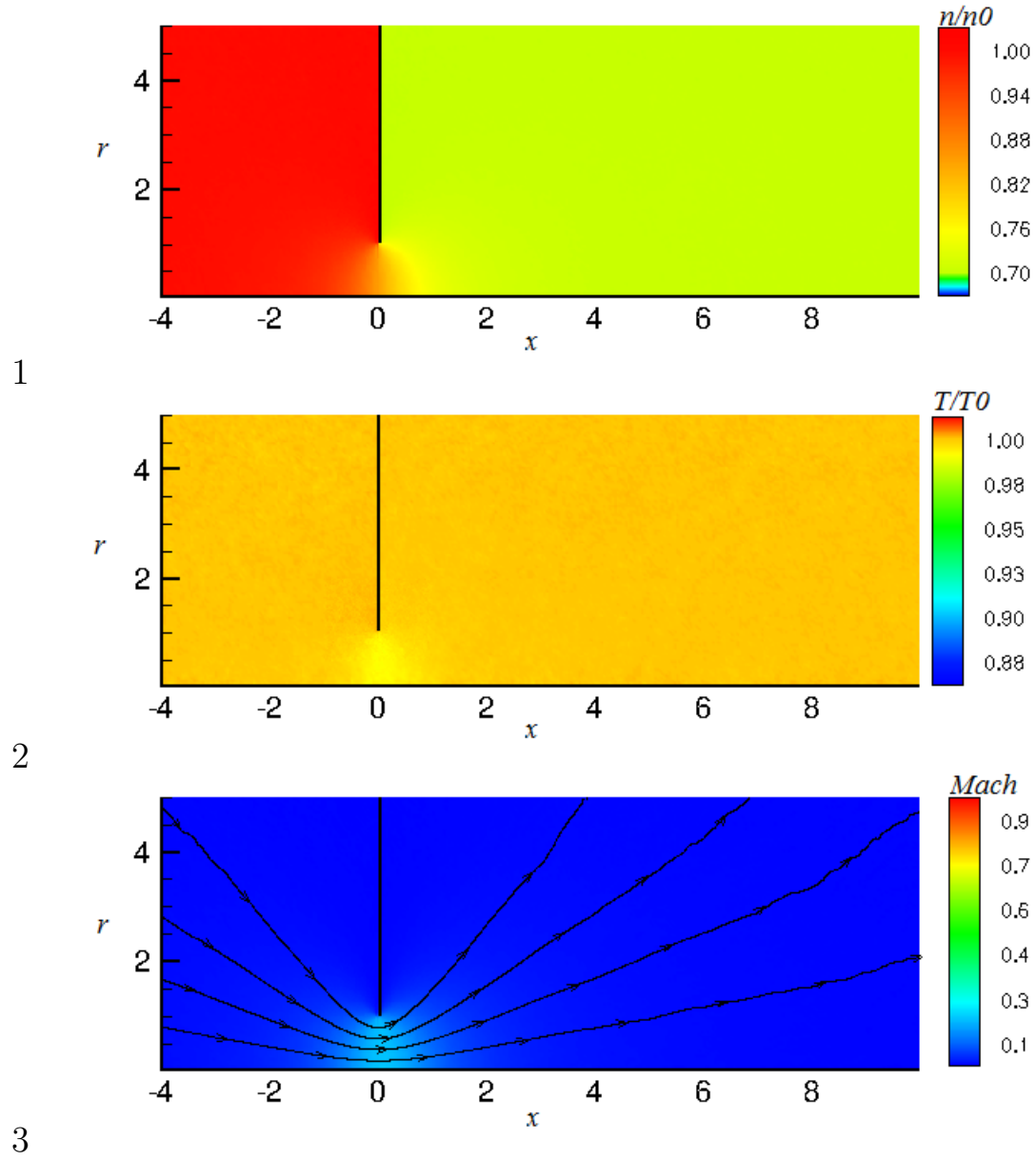


Figura A.19: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,7$  e  $\delta = 0,5$ .

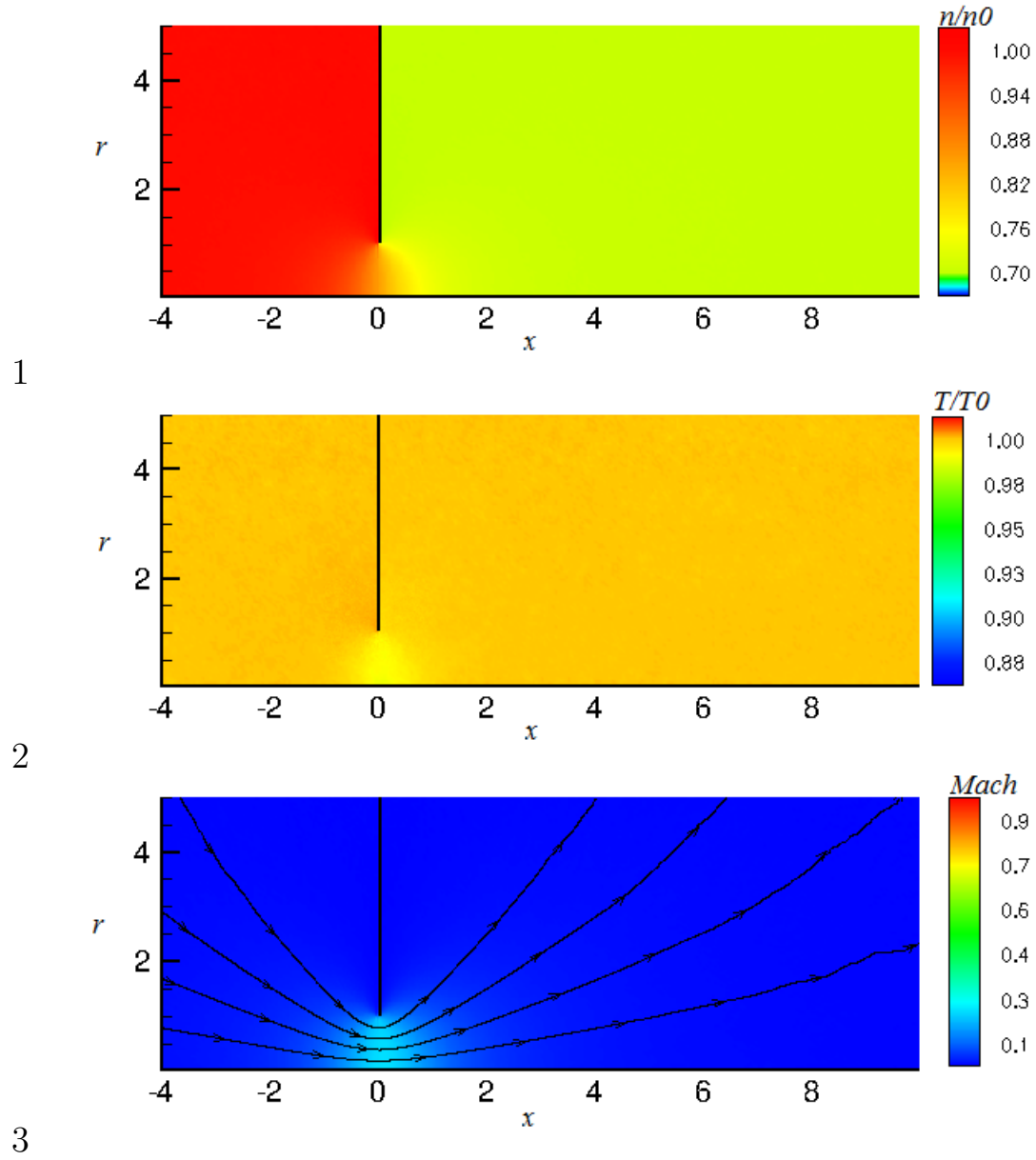


Figura A.20: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,7$  e  $\delta = 1$ .

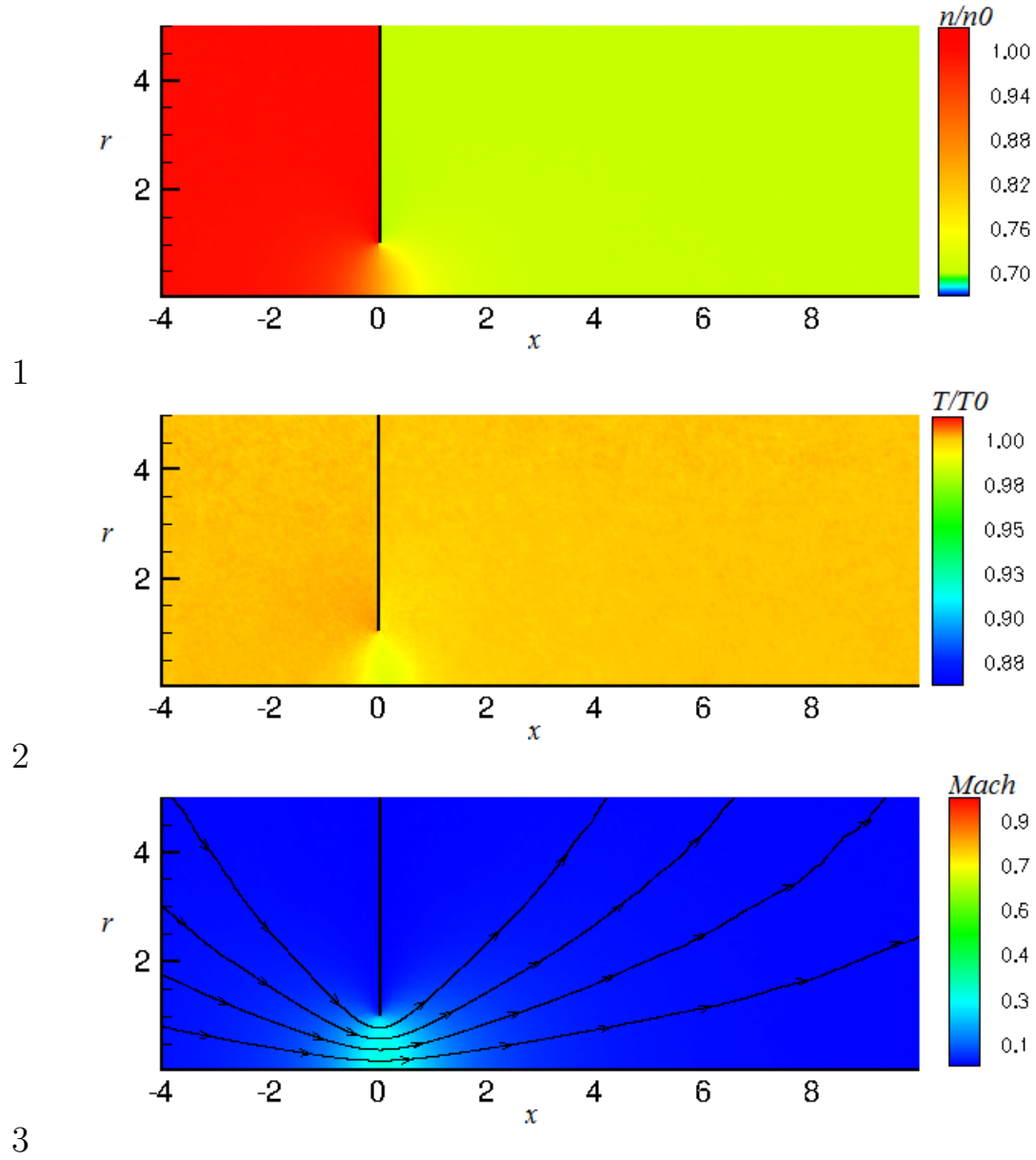


Figura A.21: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,7$  e  $\delta = 2$ .

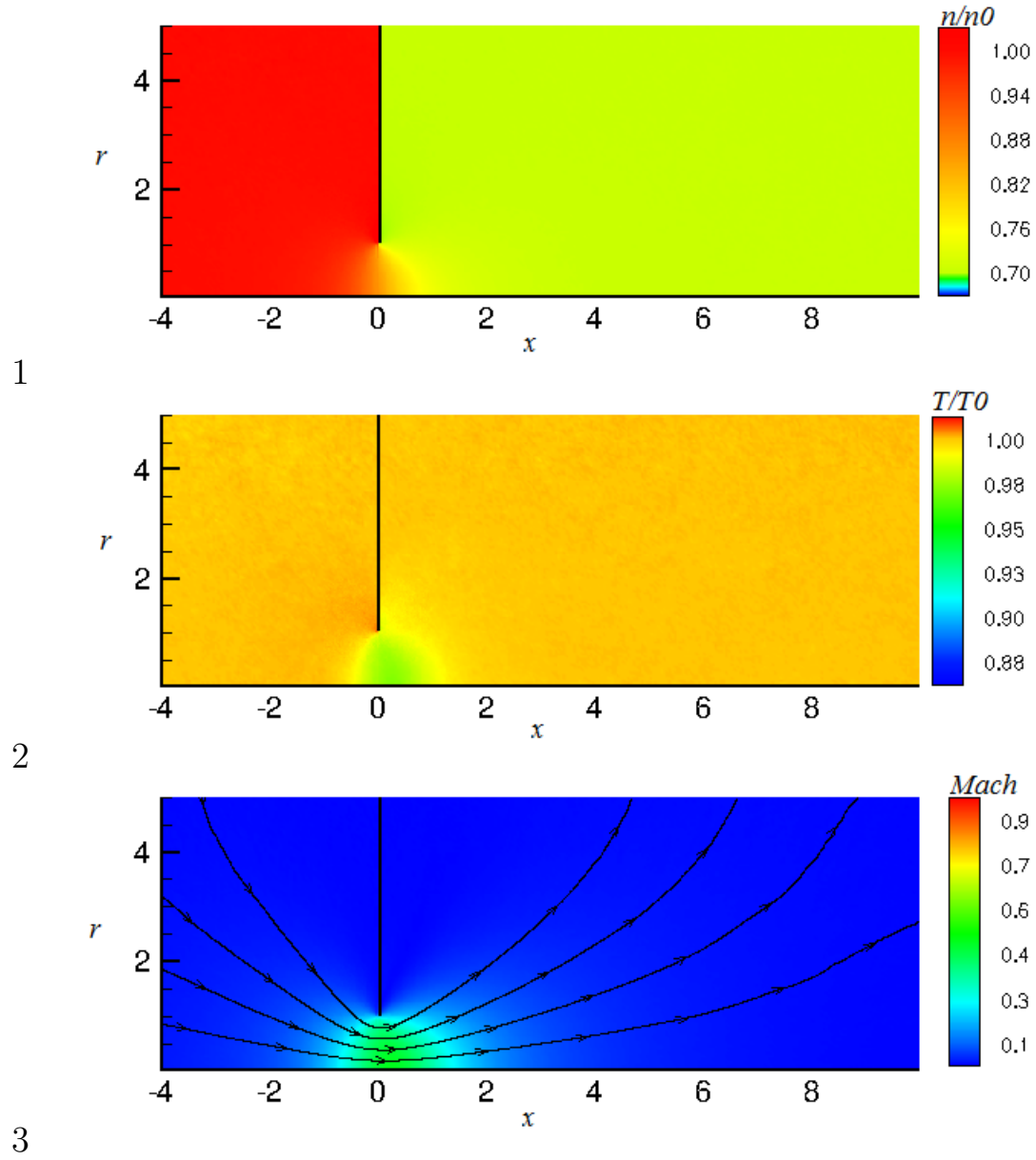


Figura A.22: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,7$  e  $\delta = 5$ .

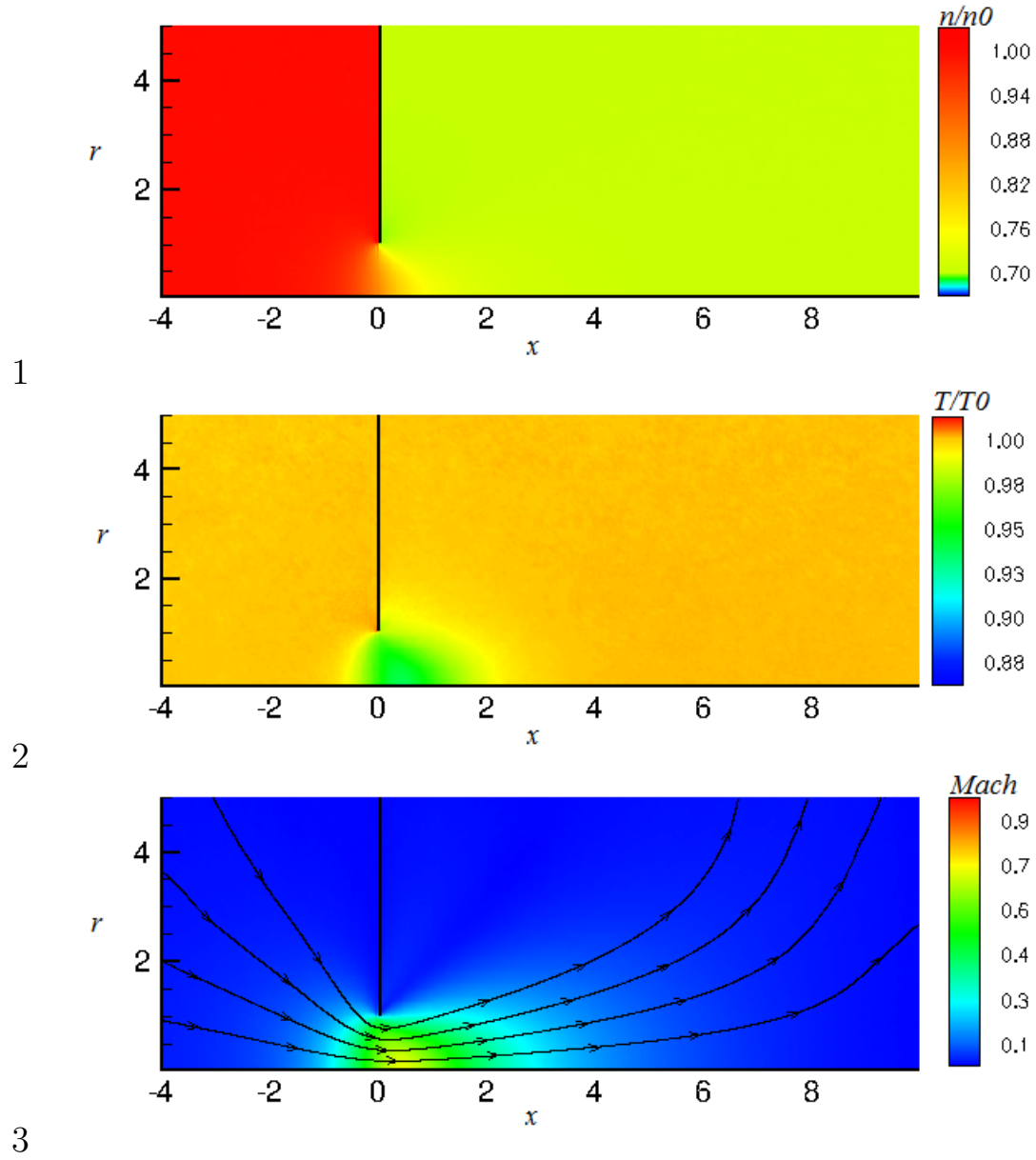


Figura A.23: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,7$  e  $\delta = 10$ .

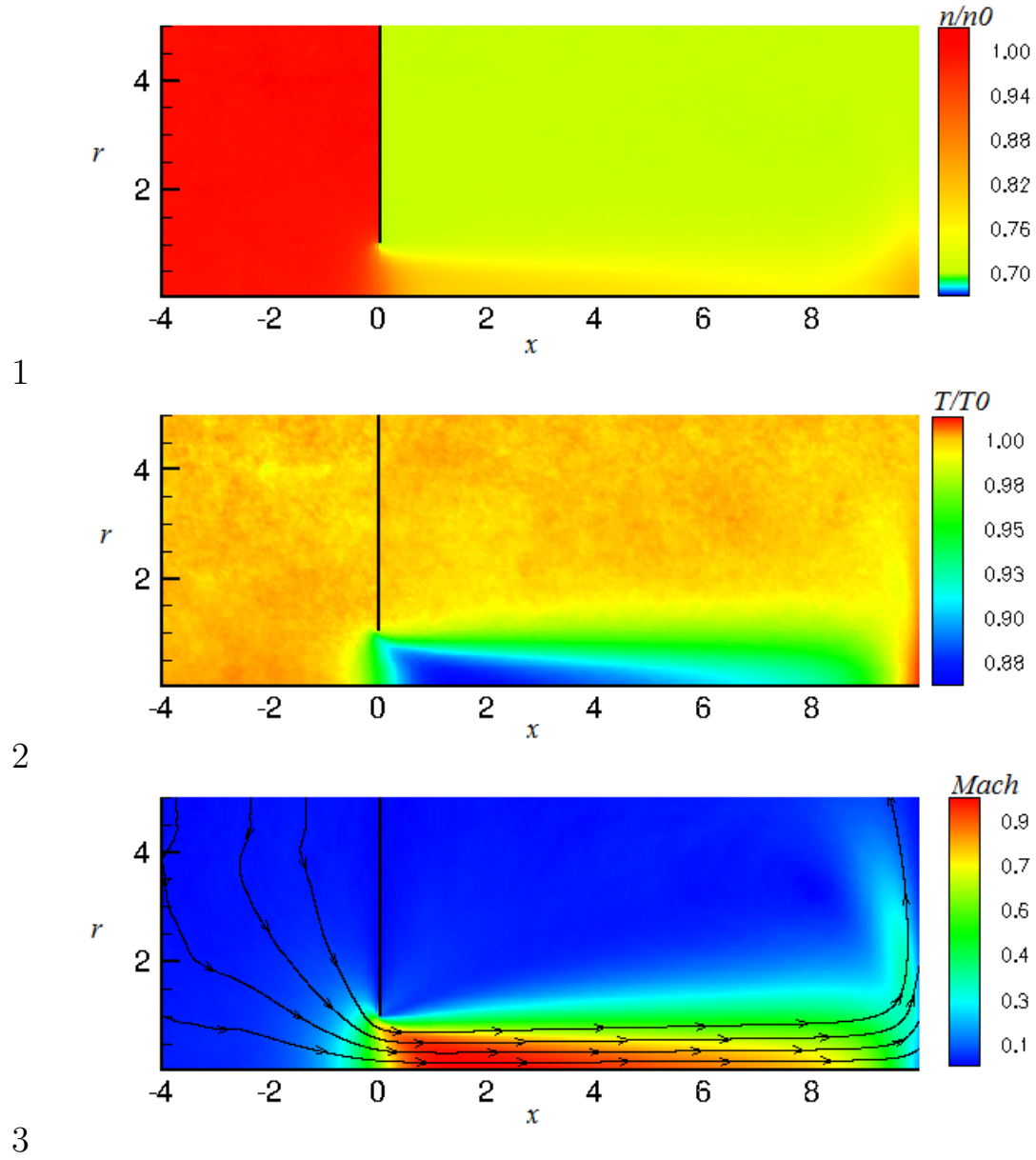


Figura A.24: Distribuição de (1) densidade numérica ( $n$ ), (2) temperatura  $T$  e (3) Mach local  $M$  para  $p_1/p_0 = 0,7$  e  $\delta = 100$ .



# Apêndice B

## Potenciais *Ab initio*

### B.1 Considerações gerais

Os potenciais *ab initio* que temos na literatura são os seguintes: Para o Hélio, temos o potencial dado por Janzen e Aziz [176]. Temos também Bich, Hellmann e Vogel [177] e [56]. Para o Argônio, temos o potencial dado por Azis [178], [63], e também [56] [179]. Para o Neônio temos Bich, Hellmann e Vogel [180] e também [56]. Para o Criptônio nós temos o potencial dado por Nasrabad e Deiters [57] e por Tao [181], [182] e [179]. Para o Xenônio temos o artigo de Slavícek *et ali.* [179]. Para He<sub>2</sub>, Ne<sub>2</sub>, Ar<sub>2</sub>, He-Ne, He-Ar, e Ne-Ar temos o potencial dado por Cybulski e Toczyłowski [56]. Para He-Kr, Ne-Kr, Ar-Kr, e Kr-2 temos Haley e Cybulski [63] e [182].

### B.2 Potencial para o He

De Janzen e Aziz [176] “An accurate potential energy curve for helium based on *Ab initio* calculations” (1996), temos a seguinte expressão para o potencial

$$U(r) = A \exp(-\alpha r + \beta r^2) - \left[ 1 - \left( \sum_{k=0}^6 (\delta r)^k / k! \right) \right. \\ \left. \times \exp(-\delta r) \right] C_6 f(r) / r^6$$

$$-\sum_{n=4}^8 \left[ 1 - \left( \sum_{k=0}^{2n} (\delta R)^k / k! \right) \exp(-\delta r) \right] C_{2n} / r^{2n},$$

e os parâmetros podem ser encontrados na Tabela 1 do artigo e estão reproduzidos aqui na tabela B.1.

Tabela B.1: Parâmetros para o He da Ref. [176]		
Parâmetro	Valor	
$A$	$2,074364263 \times 10^6$ K	
$\alpha$	$1,88648251$ bohr $^{-1}$	
$\beta$	$-6,20013490 \times 10^{-2}$ bohr $^{-2}$	
$\delta$	$1,94861295$ bohr $^{-1}$	
$C_6$	$1,4609778$ a.u.	
$C_8$	$1,4117855 \times 10^1$ a.u.	
$C_{10}$	$1,8369125 \times 10^2$ a.u.	
$C_{12}$	$3,265 \times 10^3$ a.u.	
$C_{14}$	$7,644 \times 10^4$ a.u.	
$C_{16}$	$2,275 \times 10^6$ a.u.	
$\epsilon/k_B$ (K)	$11,0514$ (SAPT1)	$11,0610$ (SAPT2)
$r_m$ (nm)	$0,296475$ (SAPT1)	$0,296463$ (SAPT2)

De Bich, Hellmann e Vogel [177] o potencial é dado pela equação

$$U(r) = A \exp(a_1 r + a_2 r^2 + a_{-1} r^{-1} + a_{-2} r^{-2} + d_1 \sin(d_2 r + d_3)) - \sum_{n=3}^8 f_{2n}(r) \frac{C_{2n}}{R^{2n}} \times \left[ 1 - \exp(-br) \sum_{k=0}^{2n} \frac{(br)^k}{k!} \right]. \quad (\text{B.1})$$

e os parâmetros são dados na tabela B.2.

Tabela B.2: Parâmetros para o He de Ref. [177].  $a_0$  é o raio de Bohr.

A (K)	0,307092338615E+07
$a_1(a_0^{-1})$	-0,201651289932E+01
$a_{-1}(a_0)$	-0,431646276045E+00
$a_2(a_0^{-2})$	-0,459521265125E-01
$a_{-2}(a_0^2)$	0,138539045980E+00
$d_1$	0,167127323768E-02
$d_2(a_0^{-1})$	0,178284243205E+01
$d_3$	0,176635702255E+01
$b(a_0^{-1})$	0,203625105759E+01
$C_6(Ka_0^6)$	0,4616213781E+06
$C_8(Ka_0^8)$	0,4460565781E+07
$C_{10}(Ka_0^{10})$	0,5803352873E+08
$C_{12}(Ka_0^{12})$	0,1031677697E+10
$C_{14}(Ka_0^{14})$	0,2415716766E+11
$C_{16}(Ka_0^{16})$	0,7191492488E+12
$\varepsilon/k_B$ (K)	10,997898
$R_\varepsilon(a_0)$	5,608068
$\sigma$	4,990672

Os parâmetros para o He de Cybulski e Toczyłowski [56] serão colocados juntos com misturas.

Para o He na Ref. [56] há 7 aproximações. Elas são AV5Z, AV5Z+, AVQZ, AVQZ+33.221, AVTZ, AVTZ+332 e avtz+33.221. Nossa suposição inicial foi que av5z+ era a melhor aproximação. Isso foi confirmado depois. A fim de comparar as aproximações, as temos plotado sempre comparando com av5z+, por isso temos seis gráficos. Essas siglas referem-se aos chamados conjuntos base, que existem em química teórica e computacional, nos métodos pós-Hartree–Fock, e que são um conjunto de funções que são combinadas para criar orbitais moleculares. As letras DZ, TZ, QZ e 5Z significam duplo, triplo, quádruplo e quántuplo zeta, respectivamente, onde  $\zeta$  é um expoente que aparece nos chamados orbitais tipo Slater, enquanto as outras letras e números adicionam mais informações sobre o conjunto base.

Na figura B.1 temos a comparação de AV5Z+ com AV5Z. Uma vez que existe uma divergência clara, concluímos que AV5Z não é uma boa aproximação. Na figura B.2 podemos ver que há uma diferença ainda maior. Na figura B.3, vemos que não há uma diferença perceptível. Como podemos ver na figura B.4 há uma grande diferença de AVTZ para AV5Z+. Das figuras B.5 e B.6, podemos ver que não há nenhuma diferença perceptível de AVTZ+332 e, especialmente, a partir de AVTZ+3221 para AV5Z+. A conclusão é que se pode usar indiferentemente os parâmetros de AV5Z+, AVQZ+33.221, AVTZ+33.221 e AVTZ+332.

Então a Ref. [56] nos dá um grupo de cerca de quatro potenciais muito diferentes. AV5Z+ e aqueles semelhantes a ele, AV5Z, AVQZ e AVTZ. Dissemos que o AV5Z+ é o melhor, mas não provamos. Para fazer isso, devemos comparar estes quatro potenciais diferentes com outro potencial fornecido por outros autores. Nós comparamos com o potencial dado por [177] e o gráfico é dado na figura B.7. Como podemos ver, apesar do fato de que existem algumas diferenças em relação AV5Z+ para o potencial relatado por [177], o AV5Z+ é o mais próximo. Mas isso não é bom o suficiente para nos permitir escolher entre estes dois potenciais. Devemos compará-los com outros autores.

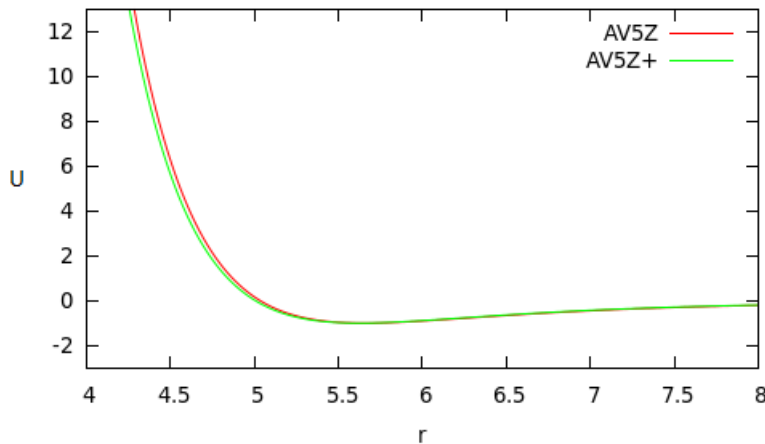


Figura B.1: Potencial AI para o He de acordo com Ref. [56], av5z vs av5z+.  $U$  em  $E_h$  (Hartree) e  $r$  em unidades de  $a_0$  (raio de Bohr).

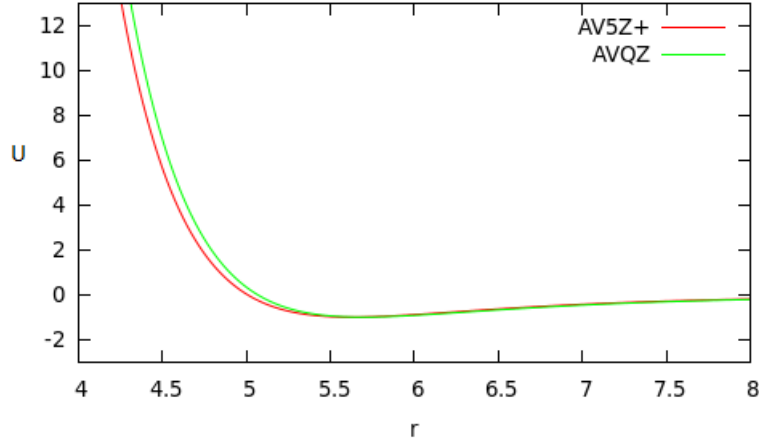


Figura B.2: Potencial AI para o He de acordo com Ref. [56], avqz vs av5z+.  $U$  em  $E_h$  (Hartree) e  $r$  em unidades de  $a_0$  (raio de Bohr).

### B.3 Potencial para Ar

De Azis [178] nós temos para o Ar

$$U_{Int} = U_{SCF} + U_{Cor}, \quad (B.2)$$

$U_{SCF}$  é dado pela equação

$$U_{SCF} = A \exp(-\alpha r + \beta r^2), \quad (B.3)$$

e  $U_{Cor}$  dado por

$$U_{Cor} = -(C_6 r^{-6} + C_8 r^{-8} + C_{10} r^{-10}) F(r) \quad (B.4)$$

$$F(r) = \exp[-(Dr_m r^{-1} - 1)^2], r < Dr_m; \quad (B.5)$$

$$F(r) = 1, r \geq Dr_m \quad (B.6)$$

$D = 1,28$  e os outros parâmetros são dados na tabela 1 do artigo. Aqui eles são reproduzidos na tabela B.3.

Da Ref. [63] o potencial é dado por

$$\begin{aligned} U(r) &= A \exp(a_1 r + a_2 r^2 + a_{-1} r^{-1} + a_{-2} r^{-2}) \\ &\quad - \sum_{n=3}^8 \frac{C_{2n}}{r^{2n}} \left[ 1 - \exp(-br) \sum_{k=0}^{2n} \frac{(br)^k}{k!} \right], \quad r \geq 0, 4R_\varepsilon \\ &= \frac{\tilde{A}}{r} \exp(-\tilde{a}r) \quad r < 0, 4r_\varepsilon \end{aligned}$$

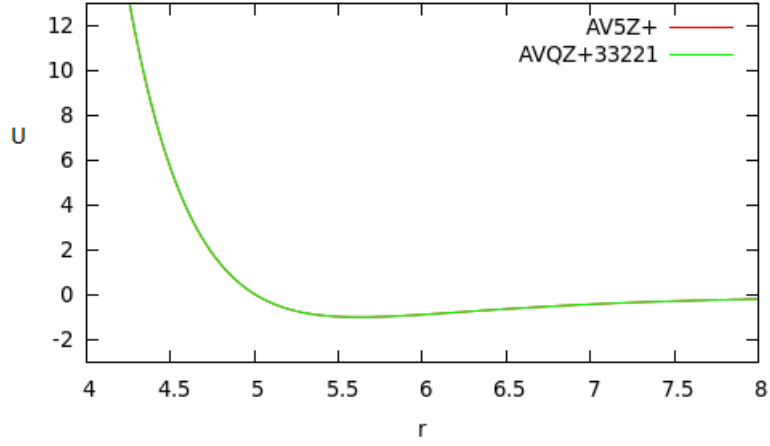


Figura B.3: Potencial AI para o He de acordo com Ref. [56], avqz+33221 vs av5z+.  $U$  em  $E_h$  (Hartree) e  $r$  em unidades de  $a_0$  (raio de Bohr).

e os parâmetros são dados na Tabela 1 do artigo e são mostrados aqui na tabela B.4.

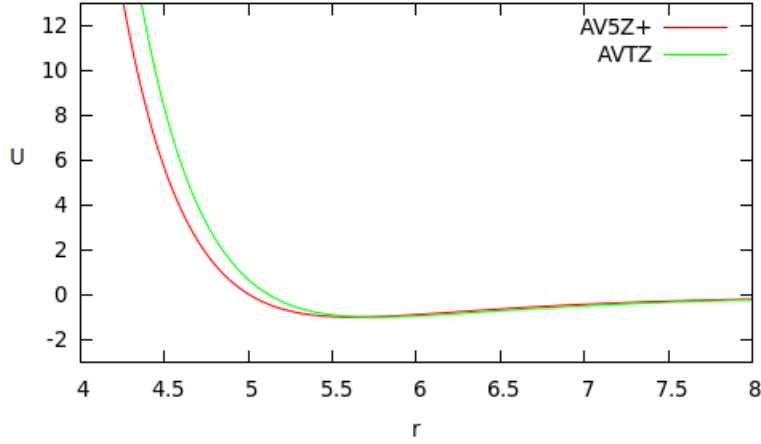


Figura B.4: Potencial AI para o He de acordo com Ref. [56], avtz vs av5z+.  $U$  em  $E_h$  (Hartree) e  $r$  em unidades de  $a_0$  (raio de Bohr).

Tabela B.3: Parâmetros para o potencial Ar-Ar HFDIDI do artigo [178]. Nem todos os dígitos mostrados são significativos.

Parâmetro	Valor
$A^*$	$8,73933927 \times 10^4$
$\alpha^*$	9,03228328
$C_6$	1,09309955
$C_8$	0,51568309
$C_{10}$	0,32521242
$C_{12}$	0,27818156
$C_{14}$	0,31111959
$C_6$ (a.u.)	63,50
$C_8$ (a.u.)	1510,00
$C_{10}$ (a.u.)	$4,80000000 \times 10^4$
$C_{12}$ (a.u.)	$2,06958126 \times 10^6$
$C_{14}$ (a.u.)	$1,16670633 \times 10^8$
$\beta^*$	-2,37132823
$\beta$	-0,16800000
$\rho$	1,10700000
$\epsilon/k_B$ (K)	143,235
$R_m$ (Å)	3,7570
$\sigma$ (Å)	3,35019
$\chi[(C_6 C_{10})/(C_8)^2]$	1,3368

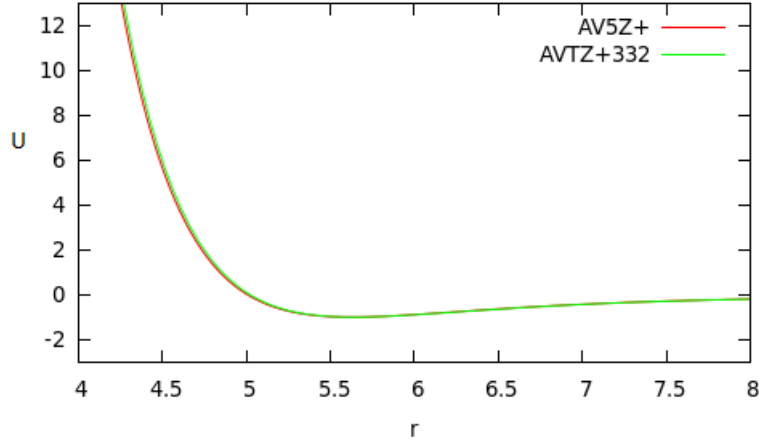


Figura B.5: Potencial AI para o He de acordo com Ref. [56], avtz+332 vs av5z+.  $U$  em  $E_h$  (Hartree) e  $r$  em unidades de  $a_0$  (raio de Bohr).

Tabela B.4: Parâmetros para o Argônio de Ref. [63].

Parâmetro	Unidade	Valor
$A$	K	$4,61330146 \times 10^7$
$a_1$	$\text{nm}^{-1}$	$-2,98337630 \times 10^1$
$a_2$	$\text{nm}^{-2}$	$-9,71208881$
$a_{-1}$	nm	$2,75206827 \times 10^{-2}$
$a_{-2}$	$\text{nm}^2$	$1,01489050 \times 10^{-2}$
$b$	$\text{nm}^{-1}$	$4,02517211 \times 10^1$
$C_6$	$\text{K nm}^6$	$4,42812017 \times 10^{-1}$
$C_8$	$\text{K nm}^8$	$3,26707684 \times 10^{-2}$
$C_{10}$	$\text{K nm}^{10}$	$2,45656537 \times 10^{-3}$
$C_{12}$	$\text{K nm}^{12}$	$1,88246247 \times 10^{-4}$
$C_{14}$	$\text{K nm}^{14}$	$1,47012192 \times 10^{-5}$
$C_{16}$	$\text{K nm}^{16}$	$1,17006343 \times 10^{-6}$
$\tilde{A}$	K nm	$9,36167467 \times 10^5$
$\tilde{a}$	$\text{nm}^{-1}$	$2,15969557 \times 10^1$
$\varepsilon/k_B$	K	143,123
$R_\varepsilon$	nm	0,376182
$\sigma$	nm	0,335741

Do artigo [56] iremos mostrar com os potenciais para as misturas. Os



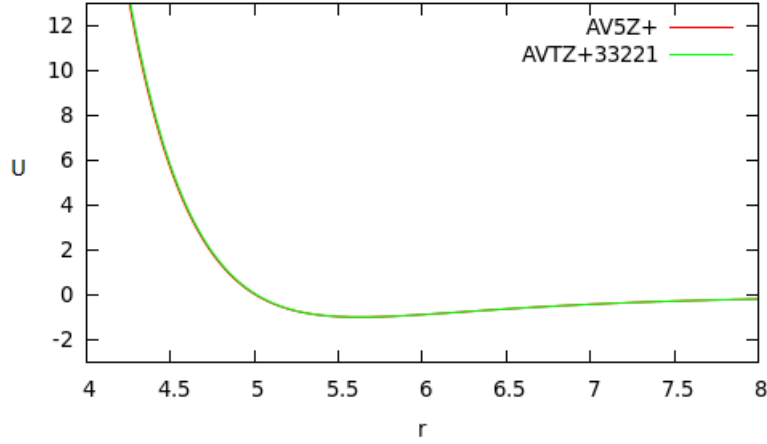


Figura B.6: Potencial AI para o He de acordo com Ref. [56], avtz+33221 vs av5z+.  $U$  em  $E_h$  (Hartree) e  $r$  em unidades de  $a_0$  (raio de Bohr).

gráficos são mostrados na figura B.8.

## B.4 Potencial para o Neônio

Para o Neônio de Bich, Hellmann e Vogel [180] o potencial é

$$U(r) = A \exp(a_1 r + a_2 r^2 + a_{-1} r^{-1} + a_{-2} r^{-2}) - \sum_{n=3}^8 \frac{C_{2n}}{r^{2n}} \left[ 1 - \exp(-br) \sum_{k=0}^{2n} \frac{(br)^k}{k!} \right] \quad (\text{B.7})$$

e os parâmetros são dados na tabela B.5.

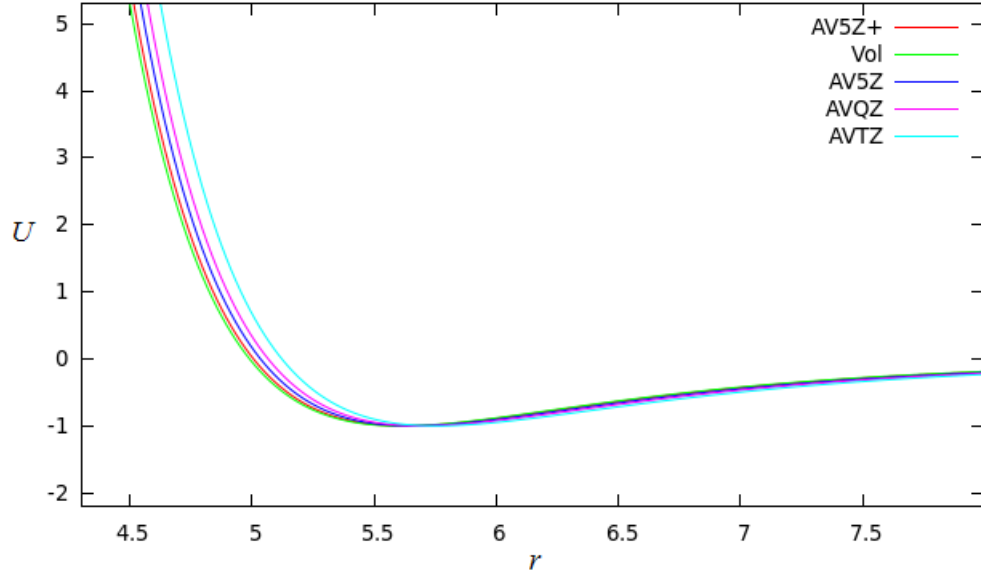
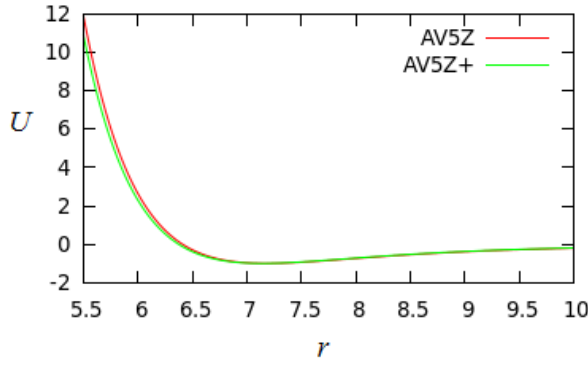


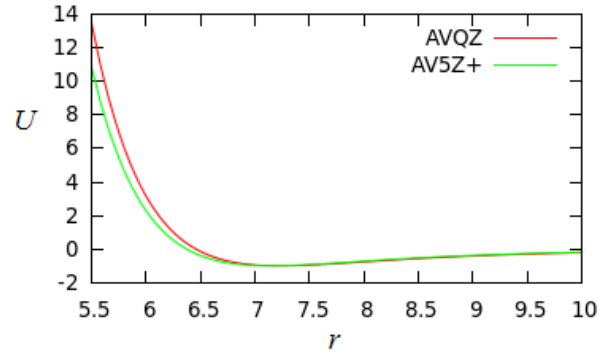
Figura B.7: Alguns potenciais AI para o He de acordo com Ref. [56] vs [177](Vol).  $U$  em  $E_h$  (Hartree) e  $r$  em unidades de  $a_0$  (raio de Bohr).

Tabela B.5: Parâmetros para o Ne de [180]

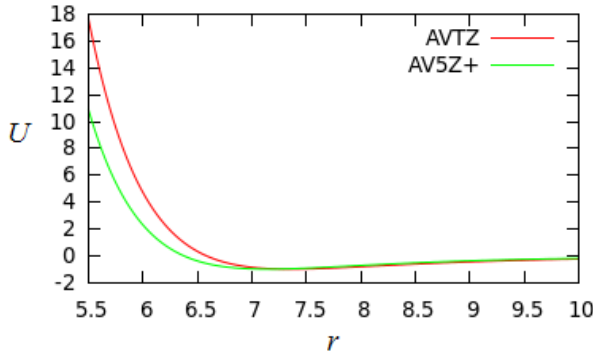
Parâmetro	Unidade	Valor
$A$	K	0,402915058383E8
$a_1$	$\text{nm}^{-1}$	$-0,428654039586 \times 10^2$
$a_2$	$\text{nm}^{-2}$	$-0,333818674327 \times 10^1$
$a_{-1}$	$\text{nm}$	$-0,534644860719 \times 10^{-1}$
$a_{-2}$	$\text{nm}^2$	$0,501774999419 \times 10^{-2}$
$b$	$\text{nm}^{-1}$	$0,492438731676 \times 10^2$
$C_6$	$\text{K nm}^6$	$0,440676750157 \times 10^{-1}$
$C_8$	$\text{K nm}^8$	$0,164892507701 \times 10^{-2}$
$C_{10}$	$\text{K nm}^{10}$	$0,790473640524 \times 10^{-4}$
$C_{12}$	$\text{K nm}^{12}$	$0,485489170103 \times 10^{-5}$
$C_{14}$	$\text{K nm}^{14}$	$0,382012334054 \times 10^{-6}$
$C_{16}$	$\text{K nm}^{16}$	$0,385106552963 \times 10^{-7}$
$\varepsilon/k_B$	K	42,152521
$R_\varepsilon$	$\text{nm}$	0,30894556
$\sigma$	$\text{nm}$	0,27612487



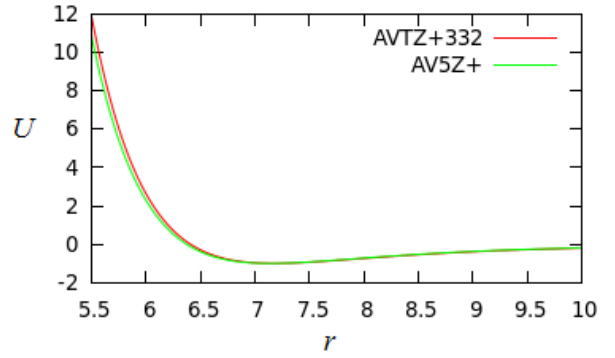
(a) AV5Z vs AV5Z+



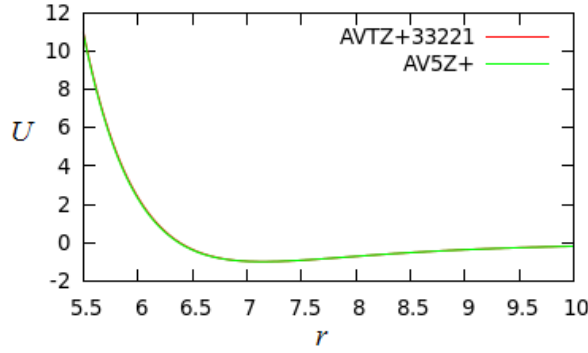
(b) AVQZ vs AV5Z



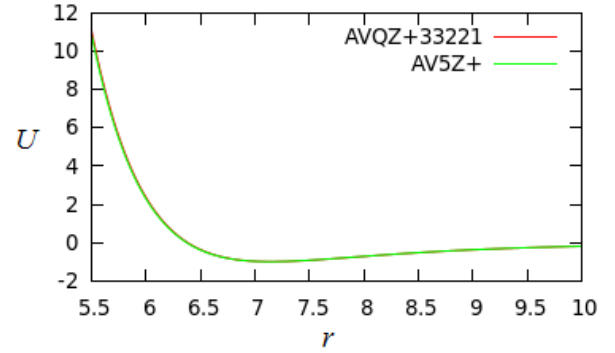
(c) AVTZ vs AV5Z+



(d) AVTZ+332 vs AV5Z+



(e) AVTZ+33221 vs AV5Z+



(f) AVQZ+33221-AV5Z+

Figura B.8: Potenciais para o Ar de acordo com o artigo Ref. [56].  $U$  em  $E_h$  (Hartree) e  $r$  em unidades  $a_0$  (raio de Bohr).

## B.5 Potencial para o Criptônio

De Nasrabad e Deiters Ref. [57] novamente o potencial tem a forma de

Korona *et ali.*

$$U(r) = Ae^{-\alpha r + \beta r^2} + \sum_{n=3}^5 f_{2n}(r, b) \frac{C_{2n}}{r^{2n}}, \quad (\text{B.8})$$

onde

$$f_{2n}(r, b) = 1 - e^{-br} \sum_{k=0}^{2n} \frac{(b)^k}{k!}. \quad (\text{B.9})$$

Os parâmetros são dados na tabela 1 de [57].

## B.6 Potencial para o Xenônio

Achamos apenas no artigo [179].

$$U(r) = A \exp(-\alpha + \beta r^2) - F(r)(C_6 r^{-6} + C_8 r^{-8} + C_{10} r^{-10}), \quad (\text{B.10})$$

onde

$$F(r) = \exp[-(Dr^{-1} - 1)^2], r < D, \quad (\text{B.11})$$

ou

$$F(r) = 1, r \geq D. \quad (\text{B.12})$$

Os parâmetros para o Xe junto com Ar e Kr são dados na tabela VIII de [179] e reproduzidos aqui na tabela B.6.

Tabela B.6: Parâmetros para o Argônio, Criptônio e Xenônio do artigo [179]. Os parâmetros são adimensionais, de modo que as distâncias são em unidades de  $r_{\min}$  e as energias em unidade de  $\varepsilon$ .

	Argônio	Criptônio	Xenônio
$A$	333634,40	47545,928	314090,82
$\alpha$	11,493139	7,3436108	10,745371
$\beta$	-1,082649	-3,8609136	1,7113429
$C_6$	1,1261753	1,0577643	1,0040372
$C_8$	0,34453349	0,47867952	0,45081234
$C_{10}$	0,72590255	0,78690783	0,76743792
$D$	1,1422763	1,5864501	0,85840495
$\varepsilon/k_B$ (K)	142,331	194,367	263,417
$r_{\min}$ (Å)	3,771	4,037	4,420

## B.7 Potencial para He2, Ne2, Ar2, He-Ne, He-Ar e Ne-Ar

De Ref. [56] nós temos a forma de potencial

$$U(r) = Ae^{-\alpha r + \beta r^2} + \sum_{n=3}^8 f_{2n}(R, b) \frac{C_{2n}}{r^{2n}}, \quad (\text{B.13})$$

e novamente

$$f_{2n}(r, b) = 1 - e^{-bR} \sum_{k=0}^{2n} \frac{(br)^k}{k!}. \quad (\text{B.14})$$

Os parâmetros são dados em muitas tabelas no artigo [56]. Há várias aproximações sendo a melhor a av5z+.

## B.8 Potencial para He-Kr, Ne-Kr, Ar-Kr e Kr-2

De Haley e Cybulski [182] nós temos novamente quase a mesma expressão

$$U(r) = Ae^{-\alpha r - \beta r^2} + \sum_{n=3}^8 f_{2n}(r, b) \frac{C_{2n}}{r^{2n}}, \quad (\text{B.15})$$

note que agora é  $-\beta$  e novamente

$$f_{2n}(r, b) = 1 - e^{-br} \sum_{k=0}^{2n} \frac{(br)^k}{k!}. \quad (\text{B.16})$$

Novamente os parâmetros são dados em muitas tabelas no artigo [182]. Há várias aproximações sendo a melhor a av5z+.